ÜBER SPEKTREN STOCHASTISCHER SCHRÖDINGEROPERATOREN

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
der Abteilung für Mathematik
an der Ruhr-Universität Bochum

von

WERNER KIRSCH

Bochum 1981

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41544708_0005

ÜBER SPEKTREN STOCHASTISCHER SCHRÖDINGEROPERATOREN

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
der Abteilung für Mathematik
an der Ruhr-Universität Bochum

von

WERNER KIRSCH

Bochum 1981

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Dissertation eingereicht am: 11.11.1981

Tag der mündlichen Prüfung : 17.12.1981

Dekan : Prof. Dr. R. Böhme

Referent : Prof. Dr. S. Albeverio

Korreferenten : Prof. Dr. V. Baumann

Prof. Dr. V. Enß

Die vorliegende Arbeit entstand in den Jahren 1980 und 1981 am Institut für Mathematik der Ruhr-Universität Bochum unter Anleitung von Prof.Dr.S.Albeverio.

Sie knüpft an die gemeinsamen Arbeiten [30] und [31] von F.Martinelli (Universität Rom) und dem Autor an.

Dafür, daß die Arbeit in der vorliegenden Fassung zustande kommen konnte, habe ich vielen Personen zu danken.

Vor allem danke ich Herrn Prof. Albeverio, daß er es verstanden hat, mich für dieses Thema zu begeistern, und für seine Geduld, sein unermüdliches Interesse, eine Vielzahl von Anregungen und Verbesserungen und viele hilfreiche Diskussionen.

Ganz besonders danke ich auch Herrn F.Martinelli, dem ich viele wertvolle Hinweise und Anregungen und fruchtbare Gespräche verdanke.

Für anregende Diskussionen danke ich den Professoren V.Enß (Bochum), M.Fukushima (Osaka) und R.Høegh-Krohn (Oslo).

Frau Richter danke ich für die sorgfältige Reinschrift des nicht immer einfachen Manuskripts.

Notationen

Wir haben uns in der Terminologie weitestgehend an Reed-Simon [53] gehalten. Abweichungen hiervon wurden in der Regel ausdrücklich als solche erwähnt. Um das Lesen der vorliegenden Arbeit etwas zu erleichtern, geben wir im folgenden eine Liste häufig gebrauchter Symbole. Die Seitenangaben beziehen sich auf die Erläuterung des Begriffs in der vorliegenden Arbeit.

$\{x_i\}$	Gitter, S.13
C_o, C_i	Einheitszellen, S.13
$C_o^\infty(R^d)$	unendlichoft differenzierbare (komplexwertige) Funktionen auf R^d
$L^p(R^d)$	p-fach integrierbare Funktionen auf R^d
$L^p_{loc}(R^d)$	lokal p-fach integrierbare Funktionen, i.e. Funktionen, die über jede kompakte Teilmenge des R^d p-fach integrierbar sind
$L^p_{loc,\,un}$	gleichmäßig lokal p-fach integrierbare Funktionen, S.15
$L^p(l^q)$	S.14
$l^q(L^p)$	S.14
supp f	Träger der Funktion oder des Maßes f
$\overline{A}$	Abschluß der Menge A
A^o	offener Kern der Menge A
χ_A	Indikatorfunktion (charakteristische Funktion) der Menge A
P_X	Bildmaß von P unter der Zufallsvariablen X

Es folgen einige in dieser Arbeit eingeführte Begriffe:

summierbar beschränkte quadratische Form	S.38
S-Schranke	S.38
lokale Form (siehe auch Fukushima [17])	S.38

distributive Form S.45

gleichmäßig summierbar beschränkte Formen S.47

Meßbarkeit selbstadjungierter Operatoren S.54

Ergodizität selbstadjungierter Operatoren S.59

Vollständigkeit einer Familie unitärer Operatoren S.67

Zulässiges Potential S.95 und S.110

Hinreichende Menge S.121

Inhaltsverzeichnis

Kapitel I: Definition stochastischer Schrödingeroperatoren und ihre Selbstadjungiertheit

Seite

§1 Einleitung 4

§2 Definition des Modells 13

§3 Selbstadjungiertheit stochastischer Schrödingeroperatoren 27

§4 Stochastische Schrödingeroperatoren, die als Formsummen definiert sind 37

Kapitel II: Ergodische Operatoren

§5 Motivation der Begriffsbildung 50

§6 Meßbarkeit und Ergodizität selbstadjungierter Operatoren 54

§7 Unabhängigkeit des Spektrums ergodischer Operatoren vom Zufall 61

§8 Das diskrete Spektrum ergodischer Operatoren 67

§9 Meßbare selbstadjungierte Operatoren 70

§10 Beispiele ergodischer Operatoren 75

§11 Einige Bemerkungen zum Eigenwertspektrum 81

§12 Schrödingeroperatoren mit fastperiodischen Potentialen 84

Anhang 1: Meßbarkeit und schwache Meßbarkeit 88

Anhang 2: Meßbarkeit gewisser Projektionsoperatoren 90

Kapitel III: Das Spektrum gewisser stochastischer Schrödingeroperatoren

§13 Zulässige Potentiale I (Operatorsummen) 94

§14 Zulässige Potentiale II(Formsummen) 107

§15 Existenz von Energielücken 116

Literaturverzeichnis 130

Kapitel I: Definition stochastischer Schrödingeroperatoren und ihre Selbstadjungiertheit

§ 1. Einleitung

Festkörper bestehen aus einer Vielzahl von Teilchen (Größenordnung 10^{23}), nämlich Atomkernen und Elektronen. Ihr charakteristisches Merkmal ist eine mehr oder weniger regelmäßige Anordnung der Atomkerne oder auch Ionen nahe den Punkten eines Kristallgitters (vgl. Kittel [33], Ludwig [39], Omar [49], Ziman [62]). Eine exakte Lösung der zugehörigen Schrödingergleichung ist wegen der außerordentlich großen Anzahl von Variablen selbstverständlich unmöglich. Daher existieren zur theoretischen Untersuchung von Festkörpern eine Reihe von Näherungsansätzen, die z.B. die Wechselwirkungen beteiligter Teilchen vernachlässigen.

So reicht für manche Zwecke bereits der Ansatz freier Elektronen aus (siehe z.B. Kittel [33]), d.h. man vernachlässigt alle auf die Elektronen wirkende Wechselwirkungen, behandelt die Elektronen also als freie Teilchen.

Zur Untersuchung der Energiezustände von Elektronen in Festkörpern, sowie für Leitfähigkeitsuntersuchungen hat sich die sogenannte Ein-Elektron-Näherung als besonders brauchbar erwiesen (siehe z.B. Kittel [33], Ludwig [39], Omar [49]). Bei dieser Näherung nimmt man an, daß sich die Atomkerne bzw. Ionen unbeweglich in den Punkten eines Kristallgitters befinden, und vernachlässigt die Wechselwirkung der Elektronen untereinander. Das Resultat ist ein Ein-Teilchen-Schrödingeroperator mit (durch die Atomkerne erzeugtem) periodischem Potential. Man kann die Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu einem gewissen Teil mitberücksichtigen, indem man zum periodischen Potential der Kerne noch ein "gemitteltes" Elektronenpotential hinzuaddiert, das die Periodizität des Potentials nicht stört (vgl. z.B. Ludwig [39], Omar [49]). Ist $\{x_i\}$ das betrachtete Kristallgitter, f das von einem einzelnen Kraftzentrum

(Atomkern, Ion) erzeugte Potential, so hat das Gesamtpotential V die Gestalt:

$$V(x) = \sum_i f(x-x_i) \qquad (1)$$

wobei über das gesamte Kristallgitter zu summieren ist. Das Potential f kann einen Anteil des "gemittelten" Elektronenpotentials enthalten.

Schrödingeroperatoren mit periodischen Potentialen sind in der mathematisch-physikalischen Literatur eingehend untersucht worden (z.B. Odeh,Keller [48], Thomas [60], Avron, Grossmann, Rodriguez [5] , [6]). Gute Übersichten bieten der Abschnitt XIII.16 in Reed-Simon IV[53] und das Buch von Eastham [14].

Eine charakteristische Eigenschaft periodischer Schrödingeroperatoren ist die Bandstruktur ihrer Spektren : Das Spektrum setzt sich aus abgeschlossenen Intervallen zusammen, den sogenannten Bändern, die in der Regel durch "Bandlücken" oder "verbotene Zonen" voneinander getrennt werden. Physikalisch bedeutet dies, daß die Energie eines Elektrons kontinuierlich variieren kann, solange sie sich in Bändern befindet, jedoch keine Werte aus den verbotenen Zonen annehmen kann. Über periodische Schrödingeroperatoren ist ferner bekannt, daß sie (unter schwachen Voraussetzungen) absolutstetiges Spektrum haben, insbesondere haben die Spektren also keine isolierten Punkte.

In der vorliegenden Arbeit werden Schrödingeroperatoren mit stochastischen Potentialen untersucht, die als "zufällige Abweichungen" von periodischen Potentialen angesehen werden können. Das zum Gitterpunkt x_i gehörige Teilchen erzeuge ein Potential $f_i(\omega,x-x_i)$, dessen Zufallsabhängigkeit durch das Argument ω angedeutet werden soll. Das Gesamtpotential ist dann gegeben durch:

$$V_\omega(x) = \sum_i f_i(\omega,x-x_i) \qquad (2)$$

Die zugehörigen Schrödingeroperatoren sind:

$$H_\omega = -\Delta + V_\omega \qquad (3)$$

Beispiele für die Potentiale $f_i(\omega)$ diskutieren wir im Verlauf der vorliegenden Arbeit. Das durch (2) gegebene Potential kann als Modell für verschiedene Arten von Unordnung in Festkörpern dienen. Ein Beispiel ist das Modell einer Legierung, in dem sich die verschiedenen Atomsorten in zufälliger Weise auf Gitterplätze verteilen (siehe dazu Beispiele 3,5 und 6 in §2). Ein anderes Beispiel ist ein unvollkommen geordneter Festkörper, in dem die Orte der Kraftzentren zufallsbedingt von den idealen Gitterplätzen abweichen (siehe Beispiel 4 in §2).

Bereits seit Ende der 40er Jahre werden stochastische Potentiale in der physikalischen Literatur diskutiert, wenn auch häufig die Sprache der Wahrscheinlichkeitstheorie nicht benutzt wurde. Hier sind insbesondere die Arbeiten von Saxon, Hutner [54], Luttinger [40], James, Ginzbarg [28], Kerner[29] und Borland [11] zu nennen. Das Buch von Lieb und Mattis [37] enthält neben abgedruckten einschlägigen Arbeiten eine gute Bibliographie über die frühen Arbeiten über stochastische Potentiale. Die oben genannten Arbeiten beschäftigen sich ausnahmslos mit eindimensionalen Schrödingeroperatoren. Die betrachteten Potentiale sind im wesentlichen stochastische Modifikationen von Kronig-Penney-Modellen (siehe auch §2, Beispiele 1 und 2 und die Beispiele in §4 und §15). Eine gute Zusammenfassung bildet der Übersichtsartikel von Halperin [25].

In der mehr mathematisch orientierten neueren Literatur werden insbesondere metrisch transitive stochastische Felder auf R^d als Potentiale betrachtet, die keinen direkten Bezug zu Potentiale der Gestalt (2) bzw. (1) haben (Pastur [50], [51], Gol'dshtein , Molchanov, Pastur [23], Molchanov [42], Nakao [46], Fukushima [18], [20]), sowie diskrete Versionen von Schrödingeroperatoren mit metrisch transitiven stochastischen

Feldern auf Z^d (Fukushima, Nakao, Nagai[21] , Kunz, Souillard [35], Pastur [52], Fukushima [19], [20]).

Für stochastische Schrödingeroperatoren stellen sich aus mathematischer und physikalischer Sicht eine Reihe von Problemen, an Hand derer wir nun einen Teil der angesprochenen Literatur diskutieren und in die vorliegende Arbeit einführen wollen.

1) (Wesentliche) Selbstadjungiertheit

Die wesentliche Selbstadjungiertheit eines Schrödingeroperators bedeutet physikalisch, daß die zeitliche Entwicklung des zugehörigen physikalischen Systems in eindeutiger Weise gegeben ist (vgl. Simon [58]).

Selbstadjungiertheitsfragen für stochastische Operatoren sind bisher nur wenig diskutiert worden. Solche Fragen werden in Pastur [52], Kunz, Souillard [35], sowie in Kirsch, Martinelli [30],[31] diskutiert.

In dieser Arbeit setzen wir die Untersuchungen aus [30] und [31] fort. In §2 und §3 zeigen wir, daß Potentiale der Gestalt (2) unter ziemlich schwachen Voraussetzungen wohldefiniert sind und die zugehörigen Schrödingeroperatoren wesentlich selbstadjungiert (auf $C_o^\infty(R^d)$) sind. Nach Satz 2 (§3) folgt die wesentliche Selbstadjungiertheit aus der Existenz von Momenten gewisser mit V_ω zusammenhängender Zufallsvariablen. In §10 erhalten wir daraus die wesentliche Selbstadjungiertheit von Operatoren, die von Pastur in [50], untersucht wurden. In §4 beschäftigen wir uns mit stochastischen Operatoren, die als Formsummen definiert sind, welche formal ebenfalls die Gestalt (2) haben. Hier können wir zeigen, daß in vielen Fällen die formal durch (2) gegebenen Formen relativ zum Operator $H_o = -\Delta$ formbeschränkt sind, wenn dies für die $f_i(\omega)$ gilt. Die als Formsummen definierten Operatoren (3) sind dann also selbstadjungiert.

2) Abhängigkeit des Spektrums vom Zufall

Da das Potential V_ω eines stochastischen Schrödingeroperators H_ω vom Zufall abhängt, genauer eine Zufallsvariable auf einem Wahrscheinlichkeitsraum ist, hängt das Spektrum $\sigma(H_\omega)$ a priori ebenfalls vom Zufall ab. Pastur zeigte in [52], daß für eine diskretisierte Version der Schrödingergleichung unter Ergodizitätsannahmen das Spektrum von H_ω eine nicht-zufällige Menge ist, d.h. daß es eine Teilmenge Σ von R gibt, so daß $\sigma(H_\omega) = \Sigma$ für P-fast alle ω gilt (vgl. auch Kunz,Souillard [35]). In einer gemeinsamen Arbeit mit F.Martinelli zeigten wir, daß dies für sehr allgemeine stochastische Operatoren unter einer gewissen Ergodizitätsannahme richtig ist.

In der vorliegenden Arbeit geben wir in §5 für Potentiale der Gestalt (2) eine physikalische Motivation für die später benötigte Ergodizitätsannahme. §6 beschäftigt sich mit der exakten Definition von Meßbarkeit und Ergodizität für (i.a. unbeschränkte) selbstadjungierte Operatoren. Daß praktisch alle in unserem Zusammenhang interessanten Schrödingeroperatoren meßbar im Sinne von §6 sind, zeigen wir in §9. §10 bringt eine Reihe von ziemlich allgemeinen Beispielen für ergodische Operatoren. In §7 zeigen wir, daß die Spektren, sowie verschiedene Teile der Spektren (stetiges Spektrum, Punktspektrum) von ergodischen Operatoren nicht-zufällige Mengen sind. Unter einer schwachen weiteren Voraussetzung zeigen wir in §8, daß ergodische Operatoren fast sicher keine isolierten Eigenwerte endlicher Vielfachheit haben. §11 enthält einige (auf den ersten Blick überraschende) Bemerkungen zum Eigenwertspektrum ergodischer Operatoren, insbesondere ein Beispiel dafür, daß das Eigenwertspektrum ergodischer Operatoren sehr stark vom Zufall

abhängen kann. In §12 beschäftigen wir uns mit Schrödingeroperatoren mit fastperiodischen Potentialen, die man ebenfalls als ergodische Operatoren auffassen kann. Schließlich bringen die Anhänge 1 und 2 zu Kapitel II weitere Meßbarkeitsuntersuchungen für stochastische Operatoren. Anhang 1 enthält einen Zusammenhang zwischen der Meßbarkeit von stochastischen Operatoren im Sinne von §6 und der schwachen Meßbarkeit. Anhang 2 enthält den Beweis für ein in §7 benutztes ziemlich technisches Resultat.

3) Gestalt des Spektrums

Unmittelbar an den Problemkreis 2) anschließend stellt sich das Problem, das -fast sicher konstante- Spektrum $\sigma(H_\omega)$ zu bestimmen oder wenigstens Aussagen über seine Gestalt zu machen. Insbesondere ist es interessant zu wissen, ob das Spektrum -wie im Falle periodischer Operatoren- eine Bänderstruktur hat, ob Lücken im Spektrum auftreten oder isolierte Punkte.

Für die von ihnen untersuchten metrisch transitiven Potentiale zeigten Gol'dshtein, Molchanov und Pastur [23], daß $\sigma(H_\omega)=[0,\infty[$ ist. Für gewisse diskretisierte Schrödingeroperatoren konnten Kunz und Souillard [35] das Spektrum bestimmen. Dinaburg und Sinai [12] wiesen Lücken im Spektrum gewisser quasiperiodischer Operatoren nach. Avron und Simon [7] und Moser [45] zeigten, daß von ihnen untersuchte Operatoren mit fastperiodischen Potentialen nirgends dichte Spektren haben.

Bereits im Jahre 1951 konnte Luttinger [40] die Vermutung von Saxon und Hutner [54] beweisen, daß in einer stochastischen Version des Kronig-Penney-Potentials (mit Punktwechselwirkung) an bestimmten Stellen im Spektrum Lücken auftreten.

Verwandte Untersuchungen wurden von James, Ginzbarg [28] und Kerner [29] gemacht, die zeigten, daß die Gültigkeit der Saxon-Hutner-Vermutung über die Existenz von Energielücken eine spezielle Eigenschaft der Punktwechselwirkung ist. Weitere Untersuchungen dieser Art wurden von Borland [11] gemacht. Alle diese Untersuchungen wurden an eindimensionalen Kronig-Penney-Potentialen durchgeführt.

Das Kapitel III der vorliegenden Arbeit untersucht diese Fragestellung für Potentiale der Gestalt (2). In §13 reduzieren wir die Bestimmung des (nach §7 fast sicher konstanten) Spektrums solcher Operatoren auf die Bestimmung der Spektren gewisser periodischer Schrödingeroperatoren. Daraus folgt eine Art von "Bänderstruktur" für solche stochastische Operatoren. Ferner ist das Spektrum der Abschluß seines offenen Kerns (im Gegensatz zu vielen fastperiodischen Operatoren s.o.), enthält also insbesondere keine isolierten Punkte. In §14 machen wir die gleichen Untersuchungen für stochastische Operatoren, die als Formsummen definiert sind.

In §15 erarbeiten wir Kriterien dafür, daß stochastische Operatoren der Gestalt (3) Lücken im Spektrum haben. Unsere Sätze stellen Modifikationen der Saxon-Hutner-Vermutung dar. Luttingers Resultat ergibt sich dann als Spezialfall. In diesem Spezialfall läßt sich das Spektrum des stochastischen Operators sogar explizit (d.h. bis auf Lösen algebraischer Gleichungen) bestimmen.

Analoge Resultate wie in §§13-15 gelten auch für eine drei- dimensionale Punktwechselwirkung. Die Gültigkeit der Saxon-Hutner-Vermutung in diesem Fall wurde in Kirsch, Martinelli [30] gezeigt.

Wir erwähnen noch zwei Problemkreise, die wir in dieser Arbeit nicht weiter verfolgen wollen.

4) Zustandsdichte

Eine wichtige Größe bei der Untersuchung stochastischer Operatoren stellt die sogenannte Zustandsdichte (engl. "density of states") dar. Sie gibt anschaulich die Besetzungszahlen der einzelnen Energieniveaus an. Für ihre Definition und Eigenschaften siehe die Übersichtsartikel von Pastur [50] und Fukushima [20] . Ihre physikalische Bedeutung wird in Reed-Simon IV [53] Abschnitt XIII.16 diskutiert.

Insbesondere wird in der Literatur das asymptotische Verhalten der Zustandsdichte für große und kleine Energien untersucht. Eine ausführliche Bibliographie zu diesen Fragen enthält der Artikel von Fukushima [20] .

Die Zustandsdichte für die in dieser Arbeit untersuchten Operatoren wird in Kirsch, Martinelli [32a] diskutiert.

5) Art des Spektrums

Eine der interessantesten Fragen über stochastische Operatoren ist die nach der Art des Spektrums, d.h. die Frage, ob Punktspektrum, singulär-stetiges oder absolutstetiges Spektrum vorliegt. Pastur, Gol'dshtein, und Molchanov [23] zeigten, daß eindimensionale Schrödingeroperatoren mit gewissen metrisch transitiven Potentialen reines Punktspektrum haben (vgl. auch Molchanov [42]). Das gleiche wurde von Kunz und Souillard für eindimensionale diskretisierte Schrödingeroperatoren gezeigt.

Dinaburg und Sinai fanden für bestimmte eindimensionale Operatoren

mit quasiperiodischen Potentialen einen absolutstetigen Teil des Spektrums [12] . Andere Autoren zeigten, daß absolutstetige Spektren typisch für fastperiodische Schrödingeroperatoren in einer Dimension sind (Avron, Simon [7], Bellissard, Testard [9], Moser [45]).

§ 2. Definition des Modells

In diesem Paragraphen definieren wir das in der Einleitung erwähnte Modell für Festkörper mit Unordnung (im englischen: "disordered systems").

Zunächst benötigen wir einige Definitionen:

Eine Familie $\{x_i\}_{i \in Z^d} \subset \mathbb{R}^d$ heißt ein Gitter, wenn die Abbildung $i \to x_i$ eine Darstellung der Gruppe Z^d in die Gruppe $\mathbb{R}^d$ ist und die Vektoren x_i den Raum $\mathbb{R}^d$ aufspannen.

Unter einer Basis des Gitters $\{x_i\}$ verstehen wir eine Menge von Gitterpunkten $\{a_1,\ldots,a_d\}$ so daß sich jedes x_i eindeutig als ganzzahlige Linearkombination der a_j darstellen läßt.

Eine Basis des Gitters $\{x_i\}$ ist dann insbesondere eine Basis des Vektorraumes $\mathbb{R}^d$. Jedes $x \in \mathbb{R}^d$ hat also eine eindeutige Darstellung der Form $x = \Sigma x^i a_i$. Als Einheitszelle von $\{x_i\}$ (bezüglich der Basis $\{a_1,\ldots,a_d\}$) bezeichnen wir die Menge $C_o = \{x \in \mathbb{R}^d;\ -\frac{1}{2} < x^i \leq \frac{1}{2} \text{ für alle } i=1,\ldots,d\}$.

Die Mengen $C_i = C_o + x_i$ bilden dann eine disjunkte Zerlegung des $\mathbb{R}^d$,

Mit $|i|$ bezeichnen wir die Zahl $\max\limits_{\nu=1,\ldots,d} |i_\nu|$.

In Modellen für ideale, d.h. regelmäßige Kristalle nimmt man gleichartige Kraftzentren in den Gitterpunkten x_i an, die jeweils ein Potential der Gestalt $f(x-x_i)$ erzeugen, so daß das Gesamtpotential also

$$V(x) = \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i) \tag{1}$$

ist.

Dieses Potential ist periodisch; d.h.

$$V(x+x_i) = V(x) \text{ für alle Gitterpunkte } x_i. \tag{2}$$

In unserem stochastischen Modell sind die Gitterpunkte von unterschiedlichen zufällig verteilten Kraftzentren besetzt, z.B. können an den verschiedenen Gitterplätzen verschieden große "Ladungen", genauer verschiedene Kopplungskonstanten, auftreten.

Ehe wir das Modell exakt definieren, müssen wir uns noch etwas genauer mit Potentialen der Form (1) beschäftigen. Das Potential V ist durch (1) nicht für beliebige Funktionen f wohldefiniert. Wählt man z.B. $f(x) = \frac{1}{|x|}$ so ist $V \equiv \infty$, also sicher kein sinnvolles Potential. Für die Zwecke der Quantenmechanik ist das Potential sicher dann wohldefiniert, wenn der Operator

$$H = -\Delta + V \tag{3}$$

auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ wesentlich selbstadjungiert ist.

Um in bequemer Weise Bedingungen an f angeben zu können, die sicherstellen, daß der Operator (3) auf $C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$ wesentlich selbstadjungiert ist, führen wir folgende Räume ein:

Für $p,q \geq 1$ bezeichnen wir mit $L^p(l^q)$ den Raum aller meßbaren Funktionen $\varphi: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, für die

$$\|\varphi\|_{L^p(l^q)} := \left(\int_{C_o} \left| \left(\sum_{i \in \mathbb{Z}^d} |\varphi(x-x_i)|^q \right)^{1/q} \right|^p \right)^{1/p} < \infty \tag{4}$$

gilt.

Unsere Definition von $L^p(l^q)$ ist analog zur Definition der Räume $l^q(L^p)$ in Simon [58].

Simon definiert $l^q(L^p)$ als den Raum aller meßbaren Funktionen $\varphi: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ für die

$$\|\varphi\|_{l^q(L^p)} := \left\{ \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} \left[\left(\int_{C_o} |\varphi(x-x_i)|^p \right)^{1/p} \right]^q \right\}^{1/q} < \infty \tag{5}$$

Wir können nun zeigen: (Wir erinnern daran, daß d die Raumdimension abzeichnet.)

Proposition 1: Ist die Funktion f in $L^p(l^1)$

$$\text{für } p = 2, \text{ falls } d \leq 3;\ p > 2, \text{ falls } d = 4;\ p = \frac{d}{2}, \text{ falls } d \geq 5; \qquad (6)$$

so ist der Operator

$$H = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i) \qquad (7)$$

auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ wesentlich selbstadjungiert.

Bew.: Nach Reed-Simon IV [53] Theorem XIII. 96 ist $H = -\Delta + V$ wesentlich selbstadjungiert auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$, wenn V lokal gleichmäßig p-fach integrierbar ist (kurz $V \in L^p_{loc,un}(\mathbb{R}^d)$), d.h. wenn $\int_{C_o+y} |V(x)|^p dx \leq C < \infty$ für alle $y \in \mathbb{R}^d$ und eine von y unabhängige Konstante C, wobei p wie in (6) zu wählen ist.

Da unser Potential $V(x) = \Sigma f(x-x_i)$ periodisch im Sinne von (2) ist, ist dies bereits der Fall, wenn:

$$\int_{C_o} |V(x)|^p dx < \infty \quad \text{gilt.}$$

Aber: $\int_{C_o} |V(x)|^p dx \leq \int_{C_o} |\Sigma |f(x-x_i)|\ |^p\ dx \leq \|f\|^p_{L^p(l^1)} < \infty$. □

Korollar 1: Unter den Voraussetzungen der Proposition ist die Reihe $\sum_{i \in Z^d} f(x-x_i)$ für (Lebesgue-) fast alle $x \in \mathbb{R}^d$ absolut konvergent.

Bew.: Im Beweis der Proposition wurde gezeigt:

$$\int_{C_o} \Big| \sum_{i \in Z} |f(x-x_i)| \Big|^p dx < \infty .$$

Folglich ist $\sum_{i \in Z^d} |f(x-x_i)| < \infty$ außerhalb einer Nullmenge. □

Wir machen noch einige Bemerkungen über $L^p(l^1)$:

1) $L^p(l^1) \subset L^1 \cap L^p$ $(= L^1(\mathbb{R}^d,dx) \cap L^p(\mathbb{R}^d,dx))$.

Bew.: Wegen der Jensen'schen Ungleichung gilt:

$$\|f\|_{L^p(l^1)} = \left(\int_{C_o} |\Sigma|f(x-x_i)|\ |^p dx\right)^{1/p} \geq C \int_{C_o} \Sigma\ |f(x-x_i)| = C \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)| = C\|f\|$$

wobei $C = \left(\int_{C_o} dx\right)^{1/p-1}$ ist, und wegen $(\Sigma a_n)^p \geq \Sigma a_n^p$ für $a_n \geq 0$ und $p \geq 1$ gilt:

$$\|f\|_{L^p(l^1)} = \left(\int_{C_o} |\Sigma|f(x-x_i)\ |^p dx\right)^{1/p} \geq \left(\int_{C_o} \Sigma\ |f(x-x_i)|^p dx\right)^{1/p} = \|f\|_{L^p} \cdot \square$$

2) $l^1(L^p) \subset L^p(l^1)$.

Bew.:

$$\|\varphi\|_{L^p(l^1)} = \left(\int_{C_o} \Big|\sum_{i \in Z^d} |\varphi(x-x_i)|\ \Big|^p dx\right)^{1/p}$$

$$= \lim_{N\to\infty} \left(\int_{C_o} \Big|\sum_{|i|\leq N} |\varphi(x-x_i)|\ \Big|^p dx\right)^{1/p} = (*)$$

wegen des Satzes von der majorisierten Konvergenz

$$(*) \leq \lim_{N\to\infty} \sum_{|i|\leq N} \left(\int_{C_o} |\varphi(x-x_i)|^p dx\right)^{1/p} = (**)$$

wegen der Minkowsky-Ungleichung

$$(**) = \sum_{i \in Z^d} \left(\int_{C_o} |\varphi(x-x_i)|^p dx\right)^{1/p} = \|\varphi\|_{l^1(L^p)} \qquad \square$$

3) Gilt $f \in L^p_{loc}$ und $f(x) = (|x|^{-d-\varepsilon})$ für $|x| \to \infty$, so gilt: $f \in L^p(l^1)$.

Bew.: Wir zeigen, daß f unter den gegebenen Voraussetzungen sogar in $l^1(L^p)$ liegt.

Wegen $f(x) = (|x|^{-d-\varepsilon})$ für $|x| \to \infty$ gilt

$|f(x)| \leq C\ |x|^{-d-\varepsilon}$ für alle x, für die $|x|$

groß genug ist. Folglich gibt es ein $N \in \mathbb{N}$, so daß

$$|f(x-x_i)| \leq C\ |x-x_i|^{-d-\varepsilon} \quad \text{gilt für } |i| > N$$

also gilt:

$$\sum_{i \in Z^d} \left(\int_{C_o} |f(x-x_i)|^p dx\right)^{1/p} = \sum_{|i| \leq N} \left(\int_{C_o} |f(x-x_i)|^p dx\right)^{1/p}$$

$$+ \sum_{|i|>N} \left(\int_{C_o} |f(x-x_i)|^p dx\right)^{1/p}$$

$\sum_{|i| \leq N} \left(\int_{C_o} |f(x-x_i)|^p dx\right)^{1/p} < \infty$, da f lokal p-fach integrierbar ist.

$$\sum_{|i|>N} \left(\int_{C_o} |f(x-x_i)|^p dx\right)^{1/p} \leq C \sum_{|i|>N} \sup_{x \in C_o} |x-x_i|^{-d-\varepsilon} \cdot \left(\int_{C_o} dx\right)^{1/p} < \infty ,$$

da $\sum_{|i|>0} |x_i|^{-d-\varepsilon} < \infty$ ist. □

4) $L^p(l^1)$ ist ein separabler Banachraum.

Bew.: Wir können $L^p(l^1)$ als Raum aller p-fach integrierbaren Funktionen auf C_o mit Werten in dem Banachraum $l^1(Z^d)$ auffassen. Dieser Raum ist ein Banachraum. In ihm bilden die Funktionen der Form $f(x) = \Sigma\ f_i\ \chi_{A_i}(x)$ eine dichte Menge, wobei die f_i aus einer dichten, abzählbaren Teilmenge von $l^1(Z^d)$ gewählt sind und die A_i aus einem abzählbaren Erzeuger von $\mathcal{B}(C_o)$, den Borelmengen auf C_o. □

Insbesondere ist $L^p(l^1)$ also ein polnischer Raum.

Wir wenden uns nun dem stochastischen Modell zu, d.h. wir wollen Potentiale

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-x_i) \tag{8}$$

untersuchen.

Einem solchen Potential liegt die Vorstellung zugrunde, daß die Gitterplätze in zufälliger Weise mit verschiedenartigen Kraftzentren besetzt sind. Z.B. könnten die verschiedenen Kraftzentren der Gestalt nach gleiche Potentiale

unterschiedlicher Stärke (=Kopplungskonstante) erzeugen, also $f_i(\omega,x-x_i) = q_i(\omega)f(x-x_i)$ sein. Jedoch kann auch die Gestalt der Potentiale $f_i(\omega,x-x_i)$ völlig verschieden sein, etwa unterschiedlich starke Singularitäten haben, unterschiedlichen Abfall im Unendlichen zeigen usw. Das Modell ist flexibel genug, um auch zufällige Abweichungen der Kraftzentren von den Gitterpositionen zu erlauben.

Wir legen einen Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega,\mathfrak{F},P)$ zugrunde. Da es sich im folgenden manchmal als nützlich herausstellt, setzen wir von Anfang an voraus, daß $(\Omega,\mathfrak{F},P)$ vollständig ist.

Die Untersuchungen der periodischen Potentiale legen nahe, daß die Funktionen $f_i(\omega,x)$ für festes $\omega\in\Omega$ in $L^p(l^1)$ liegen sollten, anderenfalls kann man kaum ein wohldefiniertes Potential V_ω erwarten.

Wir setzen daher voraus, daß die Funktion f_i Zufallsvariablen auf $(\Omega,\mathfrak{F},P)$ mit Werten in $L^p(l^1)$ sind.

Als σ-Algebra auf $L^p(l^1)$ betrachten wir natürlich die Borelalgebra auf dem polnischen Raum $L^p(l^1)$. Wir können also vom Bildmaß P_{f_i} des W-Maßes P unter f_i sprechen, von supp P_{f_i} im Sinne der Normtopologie auf $L^p(l^1)$ usw.

Aus Proposition 1 erhalten wir leicht folgende Kriterien für die wesentliche Selbstadjungiertheit des Operators

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i\in Z^d} f_i(\omega,x-x_i) \qquad (9)$$

auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$; dabei erfülle p die Bedingung (6):

Satz 1: a) Gibt es eine Funktion f aus $L^p(l^1)$, so daß $|f_i(\omega)| \leq f$ in $L^p(l^1)$ für alle $i \in Z^d$ und P-fast alle $\omega \in \Omega$ gilt, so ist der Operator $H_\omega = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-x_i)$ für P-fast alle $\omega \in \Omega$ auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ wesentlich selbstadjungiert.

b) Gibt es Konstanten $\{c_i\}_{i \in Z^d}$, $c_i \geq 0$, für die $\sum_{i \in Z^d} c_i < \infty$ ist $(\int_{C_o} |f_j(\omega, x-x_i)|^p dx)^{1/p} < c_i$ für alle $i,j \in Z^d$ und P-fast alle $\omega \in \Omega$, so ist H_ω auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ wesentlich selbstadjungiert.

Notation: Wenn keine Verwechslungen zu befürchten sind, schreiben wir im folgenden: "für fast alle ω" oder "fast sicher" statt "für P-fast alle $\omega \in \Omega$"; ebenso "wesentlich selbstadjungiert" statt "wesentlich selbstadjungiert auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$".

Bew. des Satzes:

Wir zeigen (wie in Proposition 1), daß $V_\omega = \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-x_i)$ lokal gleichmäßig in L^p liegt, aus Theorem XIII.96 aus Reed-Simon IV [53] folgt dann wiederum die Behauptung:

a)

$$\int_{C_o+y} |\sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-x_i)|^p dx \leq \int_{C_o+y} |\sum_{i \in Z^d} |f_i(\omega, x-x_i)|\,|^p dx$$

$$\leq \int_{C_o+y} |\sum_{i \in Z^d} |f(x-x_i)|\,|^p dx = \|f\|^p_{L^p(l^1)} < \infty$$

b)

$$(\int_{C_o+x_j} |\sum_{i \in Z^d} |f_i(\omega, x-x_i)|\,|^p dx)^{1/p}$$

$$\leq \sum_{i \in Z^d} (\int_{C_o+x_j} |f_i(\omega, x-x_i)|^p dx)^{1/p} \quad \text{(vgl. Bem. 2 nach Prop. 1)}$$

$$= \sum_{i \in Z^d} (\int_{C_o} |f_i(\omega, x+x_j-x_i)|^p dx)^{1/p}$$

$$\leq \sum_{i \in Z^d} c_{i-j} = \sum_{i \in Z^d} c_i < \infty.$$

Ist nun $y \in \mathbb{R}^d$ beliebig vorgegeben, so liegt y in genau einer Gitterzelle $C_o + X_i(y)$, dann ist:

$$C_o + y \subset \bigcup_{|j-i(y)| \leq 1} C_o + x_j$$

also gilt:

$$\int_{C_o+y} \Big| \sum_{i \in Z^d} |f_i(\omega, x-x_i)| \Big|^p dx$$

$$\leq \sum_{|j-i(y)| \leq 1} \int_{C_o+x_j} \Big| \sum_{i \in Z^d} |f_i(\omega, x-x_i)| \Big|^p dx$$

$$< \sum_{|j-i(y)| \leq 1} \Big(\sum_{i \in Z^d} C_i \Big)^p \leq 3^d \Big(\sum_{i \in Z^d} C_i \Big)^p < \infty$$

da $|j-i(y)| \leq 1$ gerade für 3^d Vektoren $j \in Z^d$ gilt. □

Zum Abschluß dieses Paragraphen wollen wir noch einige Beispiele diskutieren. Leider werden in der physikalischen und mathematischen Literatur nur wenige konkrete Beispiele für Kristallpotentiale diskutiert (siehe z.B. Kittel [33], Omar [49], Ludwig [39], Lieb und Mattis [37], Eastham [14], Reed-Simon IV [53]). Dies liegt wohl zum einen daran, daß sich explizite Lösungen, z.B. für das Spektrum oder für Wellenfunktionen, nur für ganz wenige periodische Potentiale finden lassen, zum anderen viele qualitative Eigenschaften sich unter sehr allgemeinen Annahmen zeigen lassen, z.B. Bänderstruktur des Spektrums, Abwesenheit von Eigenwerten. Ziemlich explizit gelöst wurden die nach Kronig und Penney benannten Potentiale (siehe Kronig und Penney [34] oder fast jedes Buch über Festkörperphysik). Diese Potentiale bilden den Ausgangspunkt für unsere Beispiele 1) und 2). Das wichtigste explizit lösbare periodische Potential im dreidimensionalen Raum ist ein Analogon zum Kronig-Penney-Potential, das von Albeverio und Høegh-Krohn [3] und von Grossmann, Høegh-Krohn und Mebkhout [24] untersucht wurde. Für die Untersuchung einer

stochastischen Version dieses Potentials verweisen wir auf Kirsch,Martinelli [30]. Im eindimensionalen Raum wurde ein $\frac{1}{\cos^2 x}$ -Potential von Scarf [55] explizit gelöst. (Vgl. auch Gesztesy, Kirsch [22]).

Aus physikalischen Gründen könnte man zunächst eine unendliche Summe von Coulombpotentialen: $V(x) = \Sigma f(x-x_i) = \Sigma \frac{1}{|x-x_i|}$ als besonders natürlich ansehen. Leider divergiert die Reihe für beliebiges $x \in \mathbb{R}^d$, so daß V schon aus diesen Gründen nicht in Frage kommen kann. In der Tat paßt sich das Coulombpotential $f(x) = \frac{1}{|x|}$ nicht in die in diesem Paragraphen entwickelte Theorie ein, da $f \notin L^2(1^1)$ gilt. Die Singularität bei Null macht keine Schwierigkeiten, da $\frac{1}{|x|} \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^3)$, jedoch ist der Abfall im Unendlichen nicht schnell genug. Bei näherem Hinsehen wird jedoch klar, daß das Coulombpotential auch physikalisch nicht sinnvoll ist, da ja die positiven Ladungen der Atomkerne durch die negativen Ladungen der Elektronen gerade neutralisiert werden. Tatsächlich erzeugen Ladungsanordnungen mit Gesamtladung Null ein Potential mit schnellerem Abfall als $\frac{1}{|x|}$ im Unendlichen (vgl. z.B.: Jackson [27]). Andererseits kann die Ein-Elektron-Näherung des Festkörperpotentials gerade nicht das Potential jedes einzelnen Elektrons berücksichtigen. In der Festkörperphysik ist es üblich, ein "mittleres" Potential aller Elektronen (sogenannte "verschmierte" Elektronen) im periodischen Potential mit zu - berücksichtigen (siehe z.B.: Ludwig [39] , Omar [49]). Diese gemittelten Elektronen bewirken eine Abschirmung des Potentials der Kerne. Dieses Verfahren stellt selbstverständlich nur eine Näherung dar, die jedoch das qualitative Verhalten von Festkörpern, insbesondere das Spektrum gut zu beschreiben scheint. Nimmt man z.B. an, daß die zu einem Kern gehörigen Elektronen kugelsymmetrisch um den Kern "verschmiert" sind, so hat diese

Ladungsanordnung Gesamtladung, Dipolmoment und Quadrupolmoment Null, zeigt also im Unendlichen einen $\frac{1}{|x|^4}$ - Abfall (vgl. Jackson [27]). Ein solches Potential gehört jedoch zu $L^2(l^1)$ nach Bem. 3), da die lokalen $\frac{1}{|x|}$ - Singularitäten keine Schwierigkeiten bedeuten ($\frac{1}{|x|} \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^3)$).

Nach diesen mehr heuristischen Überlegungen kommen wir zu den angekündigten Beispielen, die uns im Verlaufe dieser Arbeit noch mehrmals beschäftigen werden. Beispiele 1) und 2) sind die bereits erwähnten Kronig-Penney-Potentiale.

Die Beispiele 3) bis 6) enthalten ganz unterschiedliche Arten von stochastischen Abweichungen von der idealen Kristallstruktur. Dies zeigt die Flexibilität des Ansatzes (8).

1) Kronig-Penney-Modell mit endlichen Potentialstufen

Eines der einfachsten periodischen Potentiale ist das von Kronig und Penney [34] studierte eindimensionale "Stufenpotential". Dazu definieren wir:

$$f(x) = \chi_{[a,b]}(x) \tag{10}$$

wobei χ_A die charakteristische Funktion der Menge A bezeichnet. Das Potential V ist dann:

$$V(x) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} f(x-i)$$

wobei wir (o.B.d.A) die Menge $Z \subset \mathbb{R}$ als Gitter gewählt haben. Für $-\infty < a \leq b < +\infty$ ist f in $L^2(l^1)$, also V wohldefiniert.

Wir können in (10) Zufallsvariablen $a_i(\omega)$, $b_i(\omega)$ und $q_i(\omega)$ einführen:

$$f_i(\omega,x) = q_i(\omega)\, \chi_{[a_i(\omega),b_i(\omega)]}(x) \tag{11}$$

Dabei repräsentiert q_i die Höhe der Potentialschwelle, also die "Stärke" des Potentials. In Anlehnung an die Elektrostatik sprechen wir im folgenden

auch von der "Ladung" q_i. Die Zufallsvariable b_i-a_i stellt die Breite der Potentialschwelle, also die "Reichweite" des Potentials dar und $\frac{a_i+b_i}{2}$ schließlich das Zentrum der Kraftwirkung, im Bild der elektrischen Kräfte den "Ort" der "Ladung".

Setzen wir also $\xi_i(\omega) = \frac{a_i(\omega)+b_i(\omega)}{2}$, $\eta_i(\omega) = \frac{b_i(\omega)-a_i(\omega)}{2}$

so ergibt:

$$f_i(\omega,x) = q_i(\omega)\, \chi_{[\xi_i(\omega)-\eta_i(\omega),\ \xi_i(\omega)+\eta_i(\omega)]}(x) \tag{12}$$

eine zufällige Potentialschwelle der Stärke q_i, am Ort ξ_i mit Reichweite η_i. Gelten $|q_i| < C_1$, $|\xi_i| < C_2$, $|\eta_i| < C_3$ fast sicher, so ist:

$$|f_i(\omega,x)| \leq C_1\, \chi_{[-(C_2+C_3),C_2+C_3]}(x) .$$

Da die Funktion auf der rechten Seite dieser Ungleichung in $L^2(1^1)$ ist, folgt aus Satz 1 a):

Der Schrödingeroperator

$$H_\omega := -\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{i\in Z^d} f_i(\omega,x-x_i) \tag{13}$$

ist für fast alle ω wesentlich selbstadjungiert.

2) Kronig-Penney-Modell mit δ-Potentialen.

Geht man in Beispiel 1) für das Potential

$$f_N(x) = \frac{N}{2}\ \chi_{[-\frac{1}{N},+\frac{1}{N}]}(x)$$

zum Grenzwert $N \to \infty$ über, so erhält man anschaulich die Dirac-"Funktion" als Grenzwert.

Der Grenzübergang kann als Konvergenz der Resolventen mathematisch streng durchgeführt werden.

Wir wollen dieses Modell im Zusammenhang mit quadratischen Formen in § 4 eingehend studieren.

3) Ist f eine Funktion aus $L^p(l^1)$ (p wie in (6)) und $|q_i(\omega)| \leq C$ fast sicher, so ist nach Satz 1 a)

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} q_i(\omega) f(x-x_i) \tag{14}$$

fast sicher wesentlich selbstadjungiert.

Der Operator H_ω repräsentiert ein Modell, indem sich an festen Gitterplätzen x_i Kraftzentren befinden, die gleichartige Potentiale der Form $f(x-x_i)$ aber unterschiedlicher Stärke ("Ladung") $q_i(\omega)$ erzeugen. H_ω kann z.B. als Modell für eine Legierung aus mehreren Metallen dienen.

4) Eine zufällige Abweichung der Ladungen von den Positionen der Gitterplätze x_i kann mit Hilfe von Zufallsvariablen $\xi_i(\omega)$ beschrieben werden durch:

$$f_i(\omega,x) = f(x+\xi_i(\omega))$$

also durch ein Gesamtpotential:

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega,x-x_i) = \sum_{i \in Z^d} f(x+\xi_i(\omega)-x_i) \tag{15}$$

Soll auch die Ladung zufällig variieren können, so erhält man:

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} q_i(\omega) f(x+\xi_i(\omega)-x_i) \tag{16}$$

Gilt $|\xi_i| < C_o$, $|q_i| < C_1$ fast sicher und ist f in $l^1(L^p)$, so sind die zu (15) bzw. (16) gehörenden Schrödingeroperatoren fast sicher wesentlich selbstadjungiert. Dies zeigt man mit Hilfe von Satz 1 b). Da es im allgemeinen keine (Lebesgue-fast sicher endliche) Funktion gibt, die die Funktionen $f(x + \xi_i(\omega))$ majorisiert, führt Satz 1 a) hier nicht immer zum Ziel.

5) Die Kraftzentren könnten auch Potentiale völlig unterschiedlicher Gestalt erzeugen; z.B. seien $g_1,—,g_N \in L^p(1^1)$ die möglichen Potentiale, $N_i(\omega)$ Zufallsvariablen mit Werten in $\{1,—,N\}$, dann ist mittels

$$f_i(\omega,x) = g_{N_i(\omega)}(x)$$

ein Potential

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} g_{N_i(\omega)}(x-x_i) \tag{17}$$

definiert.

Der Operator $H_\omega = -\Delta + V_\omega$ ist wieder nach Satz 1 a) wesentlich selbstadjungiert. Dieses Beispiel läßt sich leicht auf abzählbar viele g_n oder kontinuierlich verteilte $f_i(\omega)$ verallgemeinern. Wie in 4) lassen sich räumliche Abweichungen von den Gitterpositionen erfassen.

6) Bisher hatten wir die Vorstellung zugrundegelegt, daß nur ein Kraftzentrum je Gitterzelle vorliegt. Dies ist in den meisten Kristallen nicht der Fall. In unserem Modell können wir leicht mehrere Kraftzentren erfassen.

Sind $y_1,—,y_N$ Punkte aus C_o, $f_1,—,f_N \in L^p(1^1)$ und $q_{1i},—,q_{Ni}$ Zufallsvariablen $(i \in Z^d)$, so setzen wir:

$$f_i(\omega,x) = \sum_{j=1}^{N} q_{ji}(\omega) f_j(x+y_j)$$

und erhalten damit ein Potential.

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} \sum_{j=1}^{N} q_{ji}(\omega) f_j(x+y_j-x_i) \tag{18}$$

und einen zugehörigen wesentlich selbstadjungierten Schrödingeroperator, falls $|q_{ji}| \leq C$ fast sicher gilt. Dem Potential (18) liegt folgende physikalische Vorstellung zugrunde: In der Zelle C_o+x_i befinden sich an den Stellen

$x_i+y_1,—,x_i+y_N$ Kraftzentren. Das Kraftzentrum in x_i+y_j erzeugt ein Potential der Gestalt f_j und der zufälligen Stärke $q_{ji}(\omega)$.

Man kann ohne zusätzliche Schwierigkeiten das Potential (18) mit den Beispielen 4) und 5) kombinieren, so daß auch Ort der Ladungen und Gestalt der Potentiale zufällig sind.

§ 3. Selbstadjungiertheit stochastischer Schrödingeroperatoren

In diesem Abschnitt beweisen wir die wesentliche Selbstadjungiertheit stochastischer Operatoren unter schwächeren Voraussetzungen als in Satz 1. Betrachten wir zunächst noch einmal den Fall

$$f_i(\omega,x) = q_i(\omega)f(x+\xi_i(\omega)) \tag{1}$$

also

$$V_\omega(x) = \sum_{i\in Z^d} q_i(\omega)f(x+\xi_i(\omega)-x_i) \tag{2}$$

In § 2 hatten wir die wesentliche Selbstadjungiertheit von $H_\omega = -\Delta + V_\omega$ nur zeigen können, wenn die Zufallsvariablen q_i und ξ_i beschränkt waren, wenn also

$$|q_i(\omega)| \leq C_1 \quad \text{und} \quad |\xi_i(\omega)| \leq C_2 \tag{3}$$

für alle $i\in Z^d$ und fast alle $\omega\in\Omega$ gelten.

Für die Kopplungskonstanten q_i ist diese Forderung, von einem physikalischen Standpunkt aus gesehen, nicht sehr restriktiv: Es gibt nur endlich viele chemische Elemente, also sollten auch nur endlich viele verschiedene "Ladungen" auftreten.

Dem gegenüber erscheint die beschränkte Abweichung der Kraftzentren von den Gitterplätzen, also die Forderung $|\xi_i(\omega)| \leq C_2$, physikalisch sehr viel unnatürlicher, eine solche Konstante C_2 ließe sich physikalisch kaum begründen.

Von einem mathematischen Standpunkt aus betrachtet, wäre auch der Fall von Ladungen q_i mit unbeschränkten Verteilungen interessant, da durch (3) viele interessante Verteilungen, z.B. die Normalverteilung, ausgeschlossen werden.

Gerade die Normalverteilung kann in vielen Fällen als gute Approximation auch diskreter Zufallsvariablen angesehen werden und ist darüber hinaus mathematisch gut handhabbar. Besonders für die Untersuchung der sogenannten Zustandsdichte (engl. "density of states"; für die Definition siehe z.B. Pastur [50]) sind für normalverteilte Ladungen ziemlich explizite Ergebnisse zu erwarten (siehe z.B. Pastur [50], Nakao [46] und Fukushima [20] sowie für Operatoren des hier betrachteten Typs Kirsch und Martinelli [32]).

Wir beweisen zunächst einen Satz über ziemlich allgemeine stochastische Potentiale und wenden diesen Satz auf Potentiale der Gestalt (2) an. Hierbei können die Voraussetzungen (3) wesentlich abgeschwächt werden. Im Abschnitt § 10 wenden wir Satz 2 dann auf Potentiale des z.B. von Pastur betrachteten Typs an (Pastur [50]).

Satz 2: Ist das meßbare reellwertige stochastische Feld V_ω auf $\mathbb{R}^d$ fast sicher lokal q-fach integrierbar für ein $q > 2$ falls $d \leq 4$ und $q > \frac{d}{2}$ falls $d \geq 5$ und gilt:

$$E\left(\left(\int_{C_o + x_i} |V_\omega(x)|^q dx\right)^{r/q}\right) \leq C < \infty \qquad (4)$$

mit einer von $i \in \mathbb{Z}^d$ unabhängigen Konstanten C und einer genügend großen natürlichen Zahl r, nämlich

$$r > \frac{1}{q} \frac{3q-2}{q-2} \frac{d}{2} \text{ für } d \leq 4 \text{ und } r > \frac{1}{q} \frac{(\frac{d}{2}+1)q - \frac{d}{2}}{q - \frac{d}{2}} \frac{d}{2} \text{ für } d \geq 5 \qquad (5)$$

so ist der Schrödingeroperator

$$H_\omega = -\Delta + V_\omega \qquad (6)$$

auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ fast sicher wesentlich selbstadjungiert.

Bew.: Die Beweisidee besteht darin zu zeigen, daß sich V_ω fast sicher aufspalten läßt in $V_\omega(x) = \overline{V}_\omega(x) + \overline{\overline{V}}_\omega(x)$, so daß

$$\overline{\overline{V}}_\omega(x) \geq - c|x|^2 - b$$

für gewisse $c,b \geq 0$ gilt und $\bar{\bar{V}}_\omega(x)$ lokal gleichmäßig p-fach integrierbar ist für $p = 2$ falls $d \leq 3$, $p > 2$ falls $d = 4$ und $p = \frac{d}{2}$ falls $d \geq 5$. Dann ist nach Reed-Simon IV [53] Theorem XIII.96 das Potential $\bar{\bar{V}}_\omega(x)$ infinitesimal beschränkt bezüglich $-\Delta$. Es folgt dann aus Reed-Simon II [53] Theorem X.38 und dem zugehörigen Korollar, daß

$$H_\omega = -\Delta + V_\omega = -\Delta + \overline{V}_\omega + \bar{\bar{V}}_\omega$$

auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ fast sicher wesentlich selbstadjungiert ist.

Für ein $x \in C_o + x_k$, $k \in Z^d$, definieren wir:

$$\overline{V}_\omega(x) := V_\omega(x)\chi_{\{x_i;|V_\omega(x)|\leq|k|^2\}}(x) \tag{7}$$

Dann ist $\overline{V}_\omega(x) \geq - cx^2 - b$ mit vom Gitter $\{x_i\}$ abhängigen Konstanten $c,b \geq 0$.

Wir setzen dann für $x \in C_o + x_k$:

$$\bar{\bar{V}}_\omega(x) := V_\omega(x)\chi_{\{x_i;|V_\omega(x)|>|k|^2\}}(x) \tag{8}$$

also $\bar{\bar{V}}_\omega(x) = V_\omega(x) - \overline{V}_\omega(x)$ und zeigen, daß $\bar{\bar{V}}_\omega$ fast sicher lokal gleichmäßig p-fach integrierbar ist, also in $L^p_{loc,un}(\mathbb{R}^d)$ liegt.

Dazu zeigen wir, daß

$$P(\{\omega;(\int_{C_o+x_k} |\bar{\bar{V}}_\omega(x)|^p dx)^{1/p} > 1 \text{ für unendlich viele } k \in Z^d\}) = 0 \tag{9}$$

gilt. In der Tat folgt aus (9), daß $(\int_{C_o+x_k} |\bar{\bar{V}}_\omega(x)|^p dx)^{1/p}$ für fast alle ω durch eine von k unabhängige Konstante beschränkt ist, und daraus folgt, daß $\bar{\bar{V}}_\omega$ in $L^p_{loc,un}(\mathbb{R}^d)$ liegt.

Nach dem Lemma von Borel-Cantelli folgt (9) aus der Abschätzung:

$$\sum_{k \in Z^d} P(\{\omega;(\int_{C_o+x_k} |\bar{\bar{V}}_\omega(x)|^p dx)^{1/p} > 1\}) < \infty \tag{10}$$

Es genügt also (10) zu zeigen, um die Behauptung des Satzes zu beweisen.

Dazu schätzen wir zunächst ab:

$$\Big(\int_{C_o+x_k} |\bar{\bar{V}}_\omega(x)|^p dx\Big)^{1/p} = \Big(\int_{C_o+x_k} |V_\omega(x)|^p \, \chi_{\{|V_\omega|>|k|^2\}}(x)dx\Big)^{1/p}$$

$$\leq \Big(\int_{C_o+x_k} |V_\omega(x)|^q dx\Big)^{1/q} \Big(\int_{C_o+x_k} \chi_{\{|V_\omega|>|k|^2\}}(x)dx\Big)^{\frac{1}{p}-\frac{1}{q}} = (*) \ .$$

Nach Voraussetzung ist V_ω fast sicher in $L^q(C_o+x_k)$. Nach Reed-Simon II [53] p. 30 folgt daraus, daß

$$\int_{C_o+x_k} \chi_{\{|V_\omega|>|k|^2\}}(x)dx \leq \Big(\int_{C_o+x_k} |V_\omega|^q\Big)^{1/q} \cdot |k|^{-2q}$$

gilt. Also gilt:

$$(*) \leq \Big[\Big(\int_{C_o+x_k} |V_\omega(x)|^q dx\Big)^{1/q}\Big]^{1+\frac{1}{p}-\frac{1}{q}} \cdot |k|^{-2q(\frac{1}{p}-\frac{1}{q})} \ .$$

Folglich ist:

$$P(\{\omega;\Big(\int_{C_o+x_k} |\bar{\bar{V}}_\omega(x)|^p dx\Big)^{1/p} > 1\})$$

$$\leq P(\{\omega;\Big[\Big(\int_{C_o+x_k} |V_\omega(x)|^q dx\Big)^{1/q}\Big]^{1+\frac{1}{p}-\frac{1}{q}} |k|^{-2q(\frac{1}{p}-\frac{1}{q})} > 1\})$$

$$\leq E(|\Big(\int_{C_o+x_k} |V_\omega(x)|^q dx\Big)^{1/q}|^r) \cdot |k|^{-2q \frac{(\frac{1}{p}-\frac{1}{q})}{1+\frac{1}{p}-\frac{1}{q}} r}$$

aufgrund der Tschebyscheff-Ungleichung, wobei r wie in (5) gewählt ist.

Also gilt:

$$\sum_{k\in Z^d} P(\{\omega;\Big(\int_{C_o+x_k} |\bar{\bar{V}}_\omega(x)|^p dx\Big)^{1/p} > 1\}) \leq C \sum_{k\in Z^d} |k|^{-2q \frac{(\frac{1}{p}-\frac{1}{q})}{1+\frac{1}{p}-\frac{1}{q}} r} \qquad (11)$$

Die Summe ist absolut konvergent, wenn $2q \frac{\frac{1}{p}-\frac{1}{q}}{1+\frac{1}{p}-\frac{1}{q}} r > d$ ist.

Dies ist wegen (5) in der Tat erfüllt, wobei p im Falle d = 4 nahe genug bei 2 gewählt wird.

Daraus und aus (11) folgt (10), also

$$\sum_{k\in Z^d} P(\{\omega;(\int_{C_o+x_k} |V_\omega(x)|^p dx)^{1/p} > 1\}) < \infty,$$

nach dem Borel-Cantelli-Lemma also (9) und daraus die wesentliche Selbstadjungiertheit von $H_\omega = -\Delta + V_\omega$. □

Beispiel: Läßt man im Falle d = 3 lokal Coulombsingularitäten zu, also Singularitäten wie $\frac{1}{|x|}$, so ist V_ω also lokal in $L^q(\mathbb{R}^3)$ für beliebiges $q < 3$, so genügt für die wesentliche Selbstadjungiertheit von $H_\omega = -\Delta + V_\omega$, daß $E(|\int_{C_o+x_k} |V_\omega|^q dx|^2) \leq C < \infty$ ist, z.B. für ein $q = 2{,}75$.

Bemerkung: Für die wesentliche Selbstadjungiertheit genügt es, die Ungleichung (4) nur für den Negativteil $V_\omega^- := \max(0,-V_\omega)$ zu fordern und für den Positivteil V_ω^+ die Bedingung $E(\int_{C_o+x_k} |V_\omega^+(x)|^2 dx) \leq C_k < \infty$. Dann ist V_ω^+ fast sicher lokal quadratintegrierbar. V_ω läßt sich, wie V_ω im Beweis von Satz 2 zerlegen und Satz X.38 aus Reed-Simon [53] zeigt wiederum die wesentliche Selbstadjungiertheit.

Wir wollen nun Satz 2 auf Potentiale des in § 2 betrachteten Typs anwenden. Eine Anwendung auf andere stochastische Potentiale folgt in § 10, Beispiel 3.

Korollar 1: Ist $\{f_i\}_{i\in Z^d}$ ein meßbares $l^1(L^q)$-wertiges stochastisches Feld für ein $q > \max(2,\frac{d}{2})$, haben die f_i, $i\in Z^d$, identische Verteilungen und gilt:

$$\sum_{i\in Z^d} (E|(\int_{C_o+x_i} |f_o(\omega,x)|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r} = C < \infty \qquad (12)$$

für ein r wie in (5), so ist

$$H_\omega = -\Delta + V_\omega = -\Delta + \sum_{i\in Z^d} f_i(\omega,x-x_i) \tag{13}$$

fast sicher auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ wesentlich selbstadjungiert.

Bew.: Nach Satz 2 genügt es, zu zeigen:

$$E(|(\int_{C_o+x_j} |V_\omega(x)|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r} \leq C < \infty \tag{14}$$

für r groß genug (nämlich wie in (5)) und

$$V_\omega(x) = \sum_{i\in Z^d} f_i(\omega,x-x_i) .$$

Aufgrund der Dreiecksungleichung für die L^q-Norm auf C_o+x_j (Minkowski-Ungleichung) gilt:

$$(\int_{C_o+x_j} |\sum_{i\in Z^d} f_i(\omega,x-x_i)|^q dx)^{1/q} \leq \sum_{i\in Z^d} (\int_{C_o+x_j} |f_i(\omega,x-x_i)|^q dx)^{1/q} \tag{15}$$

Mit Hilfe von (15) und erneuter Anwendung der Minkowski-Ungleichung läßt sich die linke Seite von (14) abschätzen durch:

$$E(|(\int_{C_o+x_j} |\sum_{i\in Z^d} f_i(\omega,x-x_i)|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r}$$

$$\leq E(|\sum_{i\in Z^d}(\int_{C_o+x_j} |f_i(\omega,x-x_i)|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r}$$

$$\leq \sum_{i\in Z^d} (E(|(\int_{C_o+x_j} |f_i(\omega,x-x_i)|^q dx)^{1/q}|^r))^{1/r}$$

$$= \sum_{i\in Z^d} (E(|(\int_{C_o+x_j} |f_o(\omega,x-x_i)|^q dx)^{1/q}|^r))^{1/r}$$

$$= \sum_{i\in Z^d} (E(|(\int_{C_o+x_j-x_i} |f_o(\omega,x)|^q dx)^{1/q}|^r))^{1/r}$$

$$= \sum_{i\in Z^d} (E(|(\int_{C_o+x_i} |f_o(\omega,x)|^q dx)^{1/q}|^r))^{1/r} \quad = C < \infty \quad \text{nach Voraussetzung.}$$

Bei den Abschätzungen haben wir ausgenutzt, daß die f_i identisch verteilt sind. Damit haben wir die Gültigkeit von (14) nachgewiesen; mittels Satz 2 folgt daraus die Behauptung. □

Bemerkung: Die Bedingung, daß die f_i identisch verteilt sind, und die Bedingung (12) können abgeschwächt werden zu:

$$E(|(\int_{C_o+x_j} |f_i(\omega,x)|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r} \leq C_j < \infty$$

und

$$\sum_{j \in Z^d} C_j < \infty \,. \tag{16}$$

Den obigen Beweis überträgt man auf diesen Fall ohne wesentliche Änderungen. Teil b von Satz 1 folgt dann aus Satz 2 in dieser Formulierung.

Für stochastische Felder $\{f_i\}_{i \in Z^d}$ von speziellerer Gestalt erhält man aus Korollar 1:

Korollar 2: Ist $\{q_i\}_{i \in Z^d}$ ein reellwertiges stochastisches Feld und f eine Funktion aus $l^1(L^q)$ mit $q > \max(2, \frac{d}{2})$, so gilt:

Ist

$$E(|q_i|^r) \leq C \quad < \infty \tag{17}$$

für eine von i unabhängige Konstante C und r wie in (5), so ist

$$H_\omega = - \Delta + \sum_{i \in Z^d} q_i(\omega) f(x-x_i) \tag{18}$$

auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ fast sicher wesentlich selbstadjungiert.

Bew.: folgt aus Korollar 1 und der anschließenden Bemerkung wegen:

$$E(|(\int_{C_o+x_j} |q_i(\omega)f(x-x_i)|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r}$$

$$= E(|q_i|^r)^{1/r} (\int_{C_o+x_j} |f(x-x_i)|^q dx)^{1/q}$$

$$\leq C^{1/r}(\int_{C_o} |f(x-x_i-x_j)|^q dx)^{1/q}$$

Da $f \in l^1(L^q)$ ist, folgt

$$\sum_{i \in Z^d} C^{1/r}(\int_{C_o} |f(x-x_i-x_j|^q dx)^{1/q} = C^{1/r} \|f\|_{l^1(L^q)} < \infty. \quad \square$$

Bemerkung: Für den Fall eines homogenen stochastischen Feldes $\{q_i\}$ geht (17) in $E(|q_o|^r) < \infty$ über.

Korollar 3: Ist $\{\xi_i\}_{i \in Z^d}$ ein $\mathbb{R}^d$-wertiges stochastisches Feld mit identisch verteilten ξ_i, $i \in Z^d$ und f eine Funktion aus $l^1(L^q)$ mit $q > \max(2, \frac{d}{2})$, so gilt:

Ist

$$\sum_{i \in Z^d} (P(\xi_o \in C_o+x_i))^{1/r} < \infty \tag{19}$$

für ein r wie in (5), so ist

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i+\xi_i(\omega)) \tag{20}$$

auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ fast sicher wesentlich selbstadjungiert.

Bew.: Aufgrund von Korollar 1 genügt es, zu zeigen:

$$\sum_{i \in Z^d} (E|(\int_{C_o+x_i} |f(x+\xi_o(\omega)|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r} < \infty .$$

Es gilt:

$$\sum_{i\in Z^d}(E|(\int_{C_o+x_i}|f(x+\xi_o(\omega))|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r}$$

$$= \sum_{i\in Z^d}(E|(\int_{C_o+\xi_o(\omega)}|f(x+x_i)|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r}$$

$$\leq \sum_{i\in Z^d}(\sum_{j\in Z^d}|(\int_{\check{C}_j}|f(x+x_i)|^q dx)^{1/q}|^r \; P(\xi_o\in C_j))^{1/r}$$

(wobei $\check{C}_j$ wie bereits früher die Menge $\bigcup_{|i-j|\leq 1} C_i$ bezeichnet)

$$\leq \sum_{j\in Z^d}\sum_{i\in Z^d}(\int_{\check{C}_j}|f(x+x_i)|^q dx)^{1/q} P(\xi_o\in C_j)^{1/r} = (*) .$$

Hierbei haben wir benutzt, daß für $a_i \geq 0$, $r \geq 1$ die Ungleichung $\Sigma a_i^r \leq (\Sigma a_i)^r$ gilt.

Ferner gilt:

$$(\int_{\check{C}_j}|f(x+x_i)|^q dx)^{1/q} \leq M \sum_{|k-j|\leq 1}(\int_{C_k}|f(x+x_i)|^q dx)^{1/q} .$$

Mit einer nur von q und der Dimension d abhängigen Konstanten M. Folglich ist:

$$\sum_{i\in Z^d}(\int_{\check{C}_i}|f(x+x_i)|^q dx)^{1/q} \leq \tilde{M} \|f\|_{l^1(L^q)} .$$

Daher können wir abschätzen:

$$(*) \leq \tilde{M}\|f\|_{l^1(L^q)} \sum_{j\in Z^d}(P(\xi_o\in C_j))^{1/r} < \infty . \quad \square$$

Bem.: Statt in Korollar 3 die identische Verteilung der ξ_i zu verlangen, genügt es, zu fordern:

$$P(\xi_i\in C_j) \leq K_j \quad \text{und} \quad \sum_{j\in Z^d} K_j^{1/r} < \infty .$$

Wir leiten noch eine hinreichende Bedingung für die Gültigkeit von (19) her:

Korollar 4: Aus $E(|\xi_o|^{rd}) < \infty$ folgt $\sum_{i\in Z^d}(P(\xi_o\in C_o+x_i))^{1/r} < \infty$.

Bew.: Wir setzen $y_i := \inf C_o + x_i$.

Dann ist $\Sigma |y_i|^{-\alpha} < \infty$, wenn $\alpha > d$ ist.

Es folgt:

$$\sum_{i \in Z^d} (P(\xi_o \in C_j))^{1/r} = \sum_{i \in Z^d} |y_i|^{-d} \; |y_i|^d \, (P(\xi_o \in C_j))^{1/r}$$

$$\leq \Big(\sum_{i \in Z^d} |y_i|^{-d \frac{r}{r-1}} \Big)^{\frac{r-1}{r}} \Big(\sum_{i \in Z^d} |y_i|^{dr} \, P(\xi_o \in C_j) \Big)^{1/r}$$

$$\leq \Big(\sum_{i \in Z^d} |y_i|^{-d \frac{r}{r-1}} \Big)^{\frac{r-1}{r}} E(|\xi_o|^{dr})^{1/r} < \infty$$

da $d \frac{r}{r-1} > d$ ist. □

Wir kombinieren Korollar 2 und Korollar 3 zu:

Korollar 5: Sind $\{\xi_i\}_{i \in Z^d}$ und $\{q_i\}_{i \in Z^d}$ stochastische Felder mit Werten in $\mathbb{R}^d$ bzw. $\mathbb{R}$ und haben die $\mathbb{R}^{d+1}$-wertigen Zufallsvariablen (ξ_i, q_i) identische Verteilungen, sind ferner $E(|q_o|^s) < \infty$ und $\sum_{i \in Z^d} P(\xi_o \in C_i)^{1/t} < \infty$ mit Zahlen $s,t > 0$ für die $r := (\frac{1}{s} + \frac{1}{t})^{-1}$ die Bedingung (5) erfüllt, so ist $H_\omega = -\Delta + \Sigma q_i(\omega) f(x + \xi_i(\omega) - x_i)$ f.s. wesentlich selbstadjungiert auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Bew.: Wir wenden Korollar 1 an:

$$\sum_{i \in Z^d} (E|(\int_{C_o + x_i} |q_o(\omega) \, f(x + \xi_o(\omega))|^q dx)^{1/q}|^r)^{1/r}$$

$$\leq \sum_{i \in Z^d} \{(E(|q_o|^s))^{1/s} (E|(\int_{C_o + x_i} |f(x + \xi_o)|^q dx)^{1/q}|^t)^{1/t}$$

aufgrund der Hölderungleichung. Der verbleibende Term wird wie im Beweis von Korollar 3 abgeschätzt. □

§ 4. Stochastische Schrödingeroperatoren, die als Formsummen definiert sind.

Eines der am besten untersuchten mathematischen Modelle in der Festkörperphysik ist das Kronig-Penney-Modell mit periodischem δ-Potential (siehe Kronig und Penney [34]). In diesem eindimensionalen Modell ist der Schrödingeroperator H formal gegeben durch:

$$H := -\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{i \in Z^d} \lambda\delta(x-x_i),$$

wobei δ die Dirac-"Funktion" bezeichnet.

Der Operator H kann exakt durch geeignete Randbedingungen für den Operator $-\frac{d^2}{dx^2}$ definiert werden (siehe z.B. Faris [15] für den Fall einer einzigen δ-Singularität) oder als Formsumme der durch $-\frac{d^2}{dx^2}$ definierten quadratischen Form und der quadratischen Form

$$\sum_{i \in Z^d} \lambda\delta(x-x_i)(\varphi,\psi) := \sum_{i \in Z^d} \lambda\varphi(x_i)\,\overline{\psi(x_i)}\ .$$

(siehe Reed und Simon [53] oder Faris [15] für Eigenschaften quadratischer Formen und ihre Zusammenhänge mit selbstadjungierten Operatoren sowie Kirsch und Martinelli [30] für die Formbeschränktheit des Kronig-Penney-Potentials.)

In ähnlicher Weise läßt sich eine stochastische Version

$$H_\omega = -\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{i \in Z^d} \lambda_i(\omega)\delta(x-x_i) \text{ des Kronig-Penney-Modells definieren}$$

(siehe wieder Kirsch und Martinelli [30]).

Ein solches Modell wurde z.B. von Luttinger [40] untersucht.

Hier wollen wir uns allgemeiner mit stochastischen Schrödingeroperatoren der Gestalt

Satz 3: Ist die symmetrische quadratische Form β lokal und summierbar beschränkt bezüglich $-\Delta$ mit S-Schranke 0, so ist

$$\zeta(\varphi,\psi) = \sum_{i\in Z^d} \beta_{x_i}(\varphi,\psi) \tag{4}$$

eine auf $Q(-\Delta)$ wohldefinierte symmetrische quadratische Form. Die Summe in (4) ist für alle $\varphi,\psi\in Q(-\Delta)$ absolut konvergent.

Die Form ζ ist lokal und formbeschränkt bezüglich $-\Delta$ mit relativer Schranke 0.

Insbesondere ist der Operator

$$H = -\Delta + \sum_{i\in Z^d} \beta_{x_i} \tag{5}$$

(verstanden als Formsumme) selbstadjungiert.

Bew.: Wir wählen eine glatte Zerlegung der Einheit χ_i, genauer eine Folge von Funktionen $\{\chi_i\}_{i\in Z^d}$ mit folgenden Eigenschaften:

1) $\chi_i\in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$, $0\le\chi_i(x)\le 1$, für alle $i\in Z^d$ und $x\in\mathbb{R}^d$

2) $\sum_{i\in Z^d}\chi_i(x) = 1$ für alle $x\in\mathbb{R}^d$

3) supp $\chi_i\subset(1+\alpha)C_o+x_i := \{y\in\mathbb{R}^d; \exists\, x\in C_o \;\; y = (1+\alpha)x+x_i\}\subset\tilde{C}_i$, wobei $0<\alpha<1/5$ ist.

4) $\sup_{x\in\mathbb{R}^d}\sum_{i\in Z^d}|\nabla\chi_i(x)|^2 = A<\infty$

Ferner wählen wir Funktionen $\{\tilde{\chi}_i\}_{i\in Z^d}$ mit den Eigenschaften:

1') $\tilde{\chi}_i\in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$; $0\le\tilde{\chi}_i(x)\le 1$ für alle $i\in Z^d$ und $x\in\mathbb{R}^d$

2') $\tilde{\chi}_i(x) = 1$ für $x\in$ supp χ_i

3') supp $\tilde{\chi}_i\subset(1+2\alpha)C_o+x_i\subset\tilde{C}_i$

4') $\sup_{x\in\mathbb{R}^d}\sum_{i\in Z^d}|\nabla\tilde{\chi}_i(x)|^2 = \tilde{A}<\infty$.

Es ist dann $\sup_{x\in\mathbb{R}^d}\sum_{i\in Z^d}\tilde{\chi}_i(x)\le 2^d$, da $x\in\mathbb{R}^d$ in höchstens 2^d Mengen der Form $(1+2\alpha)C_o+x_i$ liegt und $\chi_i(x)\le 1$ ist.

Lemma 1: Für jede lokale Form q auf $Q(-\Delta)$ gilt: Für $\varphi,\psi \in Q(-\Delta)$ ist

$q(\chi_i\varphi,\psi) = q(\chi_i\varphi, \tilde{\chi}_i\psi)$.

Bew.: $q(\chi_i\varphi,\psi) = q(\chi_i\varphi,\tilde{\chi}_i\psi) + q(\chi_i\varphi,(1-\tilde{\chi}_i)\psi) = q(\chi_i\varphi,\tilde{\chi}_i\psi)$,

da $\operatorname{supp} \chi_i\varphi \cap \operatorname{supp}(1-\tilde{\chi}_i)\psi = \emptyset$.

Lemma 2: Ist die lokale quadratische Form q formbeschränkt relativ zu $-\Delta$, so gilt: $q(\varphi,\varphi) = \sum_{i\in Z^d} q(\chi_i\varphi,\varphi)$.

Bew.: $\varphi \in Q(-\Delta)$, dann gilt:

$$|q(\varphi,\varphi) - \sum_{|i|\le N} q(\chi_i\varphi,\varphi)| = |q(\sum_{i\in Z^d} \chi_i\varphi,\varphi) - \sum_{|i|\le N} q(\chi_i\varphi,\varphi)|$$

$$= |q(\sum_{|i|\le N} \chi_i\varphi,\varphi) + q(\sum_{|i|>N} \chi_i\varphi,\varphi) - \sum_{|i|\le N} q(\chi_i\varphi,\varphi)|$$

$$= |q(\sum_{|i|>N} \chi_i\varphi,\varphi)| \le (a\, \langle \nabla(\sum_{|i|>N} \chi_i\varphi), \nabla(\sum_{|i|>N} \chi_i\varphi)\rangle + b\langle \sum_{|i|>N} \chi_i\varphi, \sum_{|i|>N} \chi_i\varphi\rangle)^{1/2}$$

$$(a\ \langle \nabla\varphi,\nabla\varphi\rangle + b\ \langle\varphi,\varphi\rangle)^{1/2} = (*)$$

(vgl. Schechter [56] Lemma 3.1 oder Faris [15] Proposition 5.1).

Wir wollen zeigen, daß (*) für $N \to \infty$ gegen Null konvergiert, dazu schätzen wir ab:

$$\langle \nabla(\sum_{|i|>N} \chi_i\varphi), \nabla(\sum_{|i|>N} \chi_i\varphi)\rangle$$

$$= \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla(\sum_{|i|>N} \chi_i(x)\varphi(x)|^2 dx$$

$$= \int_{\mathbb{R}^d} |\sum_{|i|>N} \nabla\chi_i(x)\varphi(x) + \sum_{|i|>N} \chi_i(x)\,\nabla\varphi(x)|^2 dx$$

$$\le (\int_{\mathbb{R}^d} |\sum_{|i|>N} \nabla\chi_i(x)\varphi(x)|^2 dx + \int_{\mathbb{R}^d} |\sum_{|i|>N} \chi_i(x)\,\nabla\varphi(x)|^2 dx)^2 = (**)\ .$$

Punktweise konvergieren $\sum_{|i|>N} \nabla\chi_i(x)\varphi(x)$ und $\sum_{|i|>N} \chi_i(x)\nabla\varphi(x)$ für $N\to\infty$ gegen Null. Nach Eigenschaft 4) bzw. 2) gilt $|\sum_{|i|>N} \nabla\chi_i(x)\varphi(x)| \le A|\varphi(x)|$ und

$$\Big|\sum_{|i|>N} \chi_i(x)\nabla\chi_i(x)\Big| \le |\nabla\varphi(x)|.$$

Da wegen $\varphi \in Q(-\Delta)$ gilt: $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ und $|\nabla\varphi| \in L^2(\mathbb{R}^d)$ folgt mittels des Satzes über majorisierte Konvergenz, daß (**) für $N\to\infty$ gegen Null konvergieren.

Auf die gleiche Weise schätzt man $<\sum_{|i|>N} \chi_i\varphi, \sum_{|i|>N} \chi_i\varphi>$ ab.

Also konvergiert $|q(\varphi,\varphi) - \sum_{|i|\le N} q(\chi_i\varphi,\varphi)|$ gegen Null für $N\to\infty$, d.h.

$$\sum_{i\in Z^d} q(\chi_i\varphi,\varphi) = \lim_{N\to\infty} \sum_{|i|\le N} q(\chi_i\varphi,\varphi) = q(\varphi,\varphi). \qquad \square$$

Bew. zu Satz 3 (Fortsetzung):

$$|\zeta(\varphi,\varphi)| \le \sum_{i\in Z^d} |\beta_{\chi_i}(\varphi,\varphi)| = \sum_{i\in Z^d} \Big|\sum_{j\in Z^d} \beta_{\chi_i}(\chi_j\varphi,\varphi)\Big| \text{ (nach Lemma 2)}$$

$$\le \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} |\beta_{\chi_i}(\chi_j\varphi,\varphi)| = \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} |\beta_{\chi_i}(\chi_j\varphi,\tilde\chi_j\varphi)| \text{ (nach Lemma 1)}$$

$$= \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} |\beta((\chi_j\varphi)_{x_i}, (\tilde\chi_j\varphi)_{x_i})|$$

$$\le \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} (a_{j-i}<\nabla(\chi_j\varphi), \nabla(\chi_j\varphi)> + b_{j-i}<\chi_j\varphi,\chi_j\varphi>)^{1/2}$$

$$(a_{j-i}<\nabla(\tilde\chi_j\varphi), \nabla(\tilde\chi_j\varphi)> + b_{j-i}<\tilde\chi_j\varphi, \tilde\chi_j\varphi>)^{1/2}$$

$$\le \Big(\sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} a_{j-i}<\nabla(\chi_j\varphi), \nabla(\chi_j\varphi)> + b_{j-i}<\chi_j\varphi,\chi_j\varphi>\Big)^{1/2}$$

$$\Big(\sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} a_{j-i} <\nabla(\tilde\chi_j\varphi), \nabla(\tilde\chi_j\varphi)> + b_{j-i} <\tilde\chi_j\varphi,\tilde\chi_j\varphi>\Big)^{1/2}$$

(Cauchy-Schwarz-Ungleichung)

$$\le \Big(\sum_{j\in Z^d} a <\nabla(\chi_j\varphi), \nabla(\chi_j\varphi)> + b <\chi_j\varphi,\chi_j\varphi>\Big)^{1/2}$$

$$\Big(\sum_{j\in Z^d} a <\nabla(\tilde\chi_j\varphi),\nabla(\tilde\chi_j\varphi)>+ b<\tilde\chi_j\varphi, \tilde\chi_j\varphi>\Big)^{1/2} \qquad (***)$$

wobei wir $a = \sum a_i$, $b = \sum b_i$ gesetzt haben.

Wir schätzen den zweiten Faktor aus (***) ab:

Zunächst ist:

$$\langle \nabla(\tilde{\chi}_i\varphi),\ \nabla(\tilde{\chi}_i\varphi)\rangle$$

$$= \langle \tilde{\chi}_i\nabla\varphi, \tilde{\chi}_i\nabla\varphi\rangle + \langle \tilde{\chi}_i\nabla\varphi,\ (\nabla\tilde{\chi}_i)\,\varphi\rangle$$

$$+ \langle (\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi,\ \tilde{\chi}_i\nabla\varphi\rangle + \langle \varphi\nabla\tilde{\chi}_i,\ \varphi\,\nabla\tilde{\chi}_i\rangle$$

$$= \langle \tilde{\chi}_i\nabla\varphi,\ \tilde{\chi}_i\nabla\varphi\rangle + \left\langle \frac{\delta}{2}\,\tilde{\chi}_i\,\nabla\varphi\ ,\ \frac{2}{\delta}\,(\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi\right\rangle$$

$$+ \left\langle \frac{2}{\delta}\,(\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi,\ \frac{\delta}{2}\,\tilde{\chi}_i\nabla\varphi\right\rangle + \langle \varphi\nabla\tilde{\chi}_i,\ \varphi\nabla\tilde{\chi}_i\rangle$$

(für beliebiges $\delta > 0$.)

$$\leq (1+\delta)\,\langle \tilde{\chi}_i\nabla\varphi,\ \tilde{\chi}_i\nabla\varphi\rangle + \left(1 + \frac{4}{\delta}\right)\langle (\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi, (\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi\rangle$$

wobei wir wieder die Cauchy-Schwarz-Ungleichung angewandt haben.

Daraus folgt dann:

$$\sum_{j\in Z^d} a\,\langle \nabla(\tilde{\chi}_j\varphi),\ \nabla(\tilde{\chi}_j\varphi)\rangle + b\,\langle \tilde{\chi}_j\varphi, \tilde{\chi}_j\varphi\rangle$$

$$\leq a(1+\delta) \sum_{j\in Z^d} \langle \tilde{\chi}_j\nabla\varphi\,,\ \tilde{\chi}_j\nabla\varphi\rangle$$

$$+ a\left(1 + \frac{4}{\delta}\right) \sum_{j\in Z^d} \langle (\nabla\tilde{\chi}_j)\varphi,\ (\nabla\tilde{\chi}_j)\varphi\rangle + b \sum_{j\in Z^d} \langle \tilde{\chi}_j\varphi,\ \tilde{\chi}_j\varphi\rangle = (+)$$

Nun gilt wegen $\sum_{j\in Z^d} |\tilde{\chi}_j(x)|^2 \leq \sum_{j\in Z^d} |\tilde{\chi}_j(x)| \leq 2^d$:

und dem Satz von der majorisierten Konvergenz:

$$\sum_{j\in Z^d} \langle \tilde{\chi}_j\nabla\varphi,\ \tilde{\chi}_j\nabla\varphi\rangle = \left\langle \sum_{j\in Z^d} |\tilde{\chi}_j|^2\ \nabla\varphi,\nabla\varphi\right\rangle \leq 2^d\langle \nabla\varphi\,,\nabla\varphi\rangle$$

und wegen $\sum_{j\in Z^d} |\nabla\tilde{\chi}_j(x)|^2 \leq \tilde{A}$ gilt:

$$\sum_{j\in Z^d} \langle (\nabla\tilde{\chi}_j)\varphi,(\nabla\tilde{\chi}_j)\varphi\rangle = \left\langle \sum_{j\in Z^d} |\nabla\tilde{\chi}_j|^2\ \varphi,\varphi\right\rangle \leq \tilde{A}\,\langle \varphi,\varphi\rangle$$

und schließlich ist

$$\sum_{j\in Z^d} \langle \tilde{\chi}_j\varphi,\tilde{\chi}_j\varphi\rangle \leq 2^d\langle \varphi,\varphi\rangle\ .$$

$$\Big| \sum_{|i|>N} \chi_i(x)\nabla\varphi(x)\Big| \leq |\nabla\varphi(x)|.$$

Da wegen $\varphi \in Q(-\Delta)$ gilt: $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ und $|\nabla\varphi| \in L^2(\mathbb{R}^d)$ folgt mittels des Satzes über majorisierte Konvergenz, daß (**) für $N \to \infty$ gegen Null konvergieren.

Auf die gleiche Weise schätzt man $< \sum_{|i|>N} \chi_i\varphi, \sum_{|i|>N} \chi_i\varphi >$ ab.

Also konvergiert $|q(\varphi,\varphi) - \sum_{|i|\leq N} q(\chi_i\varphi,\varphi)|$ gegen Null für $N \to \infty$, d.h.

$$\sum_{i\in Z^d} q(\chi_i\varphi,\varphi) = \lim_{N\to\infty} \sum_{|i|\leq N} q(\chi_i\varphi,\varphi) = q(\varphi,\varphi). \qquad \square$$

Bew. zu Satz 3 (Fortsetzung):

$$|\zeta(\varphi,\varphi)| \leq \sum_{i\in Z^d} |\beta_{x_i}(\varphi,\varphi)| = \sum_{i\in Z^d} \Big| \sum_{j\in Z^d} \beta_{x_i}(\chi_j\varphi,\varphi)\Big| \text{ (nach Lemma 2)}$$

$$\leq \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} |\beta_{x_i}(\chi_j\varphi,\varphi)| = \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} |\beta_{x_i}(\chi_j\varphi,\tilde{\chi}_j\varphi)| \text{ (nach Lemma 1)}$$

$$= \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} |\beta((\chi_j\varphi)_{x_i}, (\tilde{\chi}_j\varphi)_{x_i})|$$

$$\leq \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} (a_{j-i}\langle\nabla(\chi_j\varphi), \nabla(\chi_j\varphi)\rangle + b_{j-i}\langle\chi_j\varphi,\chi_j\varphi\rangle)^{1/2}$$

$$(a_{j-i}\langle\nabla(\tilde{\chi}_j\varphi), \nabla(\tilde{\chi}_j\varphi)\rangle + b_{j-i}\langle\tilde{\chi}_j\varphi, \tilde{\chi}_j\varphi\rangle)^{1/2}$$

$$\leq \Big(\sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} a_{j-i}\langle\nabla(\chi_j\varphi), \nabla(\chi_j\varphi)\rangle + b_{j-i}\langle\chi_j\varphi,\chi_j\varphi\rangle\Big)^{1/2}$$

$$\Big(\sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} a_{j-i}\langle\nabla(\tilde{\chi}_j\varphi), \nabla(\tilde{\chi}_j\varphi)\rangle + b_{j-i}\langle\tilde{\chi}_j\varphi,\tilde{\chi}_j\varphi\rangle\Big)^{1/2}$$

(Cauchy-Schwarz-Ungleichung)

$$\leq \Big(\sum_{j\in Z^d} a\langle\nabla(\chi_j\varphi), \nabla(\chi_j\varphi)\rangle + b\langle\chi_j\varphi,\chi_j\varphi\rangle\Big)^{1/2}$$

$$\Big(\sum_{j\in Z^d} a\langle\nabla(\tilde{\chi}_j\varphi),\nabla(\tilde{\chi}_j\varphi)\rangle + b\langle\tilde{\chi}_j\varphi, \tilde{\chi}_j\varphi\rangle\Big)^{1/2} \qquad (***)$$

wobei wir $a = \sum a_i$, $b = \sum b_i$ gesetzt haben.

Wir schätzen den zweiten Faktor aus (***) ab:

Zunächst ist:

$$\langle \nabla(\tilde{\chi}_i\varphi),\ \nabla(\tilde{\chi}_i\varphi)\rangle$$

$$= \langle \tilde{\chi}_i\nabla\varphi, \tilde{\chi}_i\nabla\varphi\rangle + \langle \tilde{\chi}_i\nabla\varphi,\ (\nabla\tilde{\chi}_i)\,\varphi\rangle$$

$$+ \langle (\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi,\ \tilde{\chi}_i\nabla\varphi\rangle + \langle \varphi\nabla\tilde{\chi}_i,\ \varphi\,\nabla\tilde{\chi}_i\rangle$$

$$= \langle \tilde{\chi}_i\nabla\varphi,\ \tilde{\chi}_i\nabla\varphi\rangle + \langle \tfrac{\delta}{2}\,\tilde{\chi}_i\,\nabla\varphi\ ,\ \tfrac{2}{\delta}\,(\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi\rangle$$

$$+ \langle \tfrac{2}{\delta}\,(\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi,\ \tfrac{\delta}{2}\,\tilde{\chi}_i\nabla\varphi\rangle \ + \langle \varphi\nabla\tilde{\chi}_i,\ \varphi\nabla\tilde{\chi}_i\rangle$$

(für beliebiges $\delta > 0$.)

$$\leq (1+\delta)\,\langle \tilde{\chi}_i\nabla\varphi,\ \tilde{\chi}_i\nabla\varphi\rangle \ + (1+\tfrac{4}{\delta})\,\langle (\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi, (\nabla\tilde{\chi}_i)\varphi\rangle$$

wobei wir wieder die Cauchy-Schwarz-Ungleichung angewandt haben.

Daraus folgt dann:

$$\sum_{j\in Z^d} a\,\langle \nabla(\tilde{\chi}_j\varphi),\ \nabla(\tilde{\chi}_j\varphi)\rangle + b\,\langle \tilde{\chi}_j\varphi, \tilde{\chi}_j\varphi\rangle$$

$$\leq a(1+\delta) \sum_{j\in Z^d} \langle \tilde{\chi}_j\nabla\varphi\ ,\ \tilde{\chi}_j\nabla\varphi\rangle$$

$$+ a(1+\tfrac{4}{\delta}) \sum_{j\in Z^d} \langle (\nabla\tilde{\chi}_j)\varphi,\ (\nabla\tilde{\chi}_j)\varphi\rangle \ + b \sum_{j\in Z^d} \langle \tilde{\chi}_j\varphi,\ \tilde{\chi}_j\varphi\rangle = (+)$$

Nun gilt wegen $\sum_{j\in Z^d} |\tilde{\chi}_j(x)|^2 \leq \sum_{j\in Z^d} |\tilde{\chi}_j(x)| \leq 2^d$:

und dem Satz von der majorisierten Konvergenz:

$$\sum_{j\in Z^d} \langle \tilde{\chi}_j\nabla\varphi,\ \tilde{\chi}_j\nabla\varphi\rangle = \langle \sum_{j\in Z^d} |\tilde{\chi}_j|^2\ \nabla\varphi, \nabla\varphi\rangle \ \leq 2^d\langle \nabla\varphi, \nabla\varphi\rangle$$

und wegen $\sum_{j\in Z^d} |\nabla\tilde{\chi}_j(x)|^2 \leq \tilde{A}$ gilt:

$$\sum_{j\in Z^d} \langle (\nabla\tilde{\chi}_j)\varphi, (\nabla\tilde{\chi}_j)\varphi\rangle = \langle \sum_{j\in Z^d} |\nabla\tilde{\chi}_j|^2\ \varphi,\varphi\rangle \leq \tilde{A}\,\langle \varphi, \varphi\rangle$$

und schließlich ist

$$\sum_{j\in Z^d} \langle \tilde{\chi}_j\varphi, \tilde{\chi}_j\varphi\rangle \ \leq 2^d\langle \varphi, \varphi\rangle\ .$$

Insgesamt folgt also

$$(+) \leq a(1+\delta)2^d \langle\nabla\varphi,\nabla\varphi\rangle + (a(1+\tfrac{4}{\delta})\tilde{A} + b2^d)\langle\varphi,\varphi\rangle.$$

Indem man die gleiche Argumentation für χ_j wiederholt, unter Beachtung von $\sum_{j\in Z^d} |\chi_j(x)|^2 \leq \sum_{j\in Z^d} |\chi_j(x)| = 1$ und von $\sum_{j\in Z^d} |\nabla\chi_j(x)|^2 \leq A$ erhält man:

$$\sum_{j\in Z^d} a\langle\nabla(\chi_j\varphi),\nabla(\chi_j\varphi)\rangle + b\langle\chi_j\varphi,\chi_j\varphi\rangle$$

$$\leq a(1+\delta)\langle\nabla\varphi,\nabla\varphi\rangle + (a(1+\tfrac{4}{\delta})A + b)\langle\varphi,\varphi\rangle \quad .$$

Wenn wir nun die obigen Abschätzungen zusammenfassen, erhalten wir:

$$\begin{aligned}|\zeta(\varphi,\varphi)| \leq\ & (a(1+\delta)\langle\nabla\varphi,\nabla\varphi\rangle + (a(1+\tfrac{4}{\delta})A+b)\langle\varphi,\varphi\rangle)^{1/2} \\ & (a(1+\delta)2^d\langle\nabla\varphi,\nabla\varphi\rangle + (a(1+\tfrac{4}{\delta}\tilde{A} + b2^d)\langle\varphi,\varphi\rangle)^{1/2} \\ \leq\ & \tfrac{1}{2}\{a(1+\delta)\langle\nabla\varphi,\nabla\varphi\rangle + (a(1+\tfrac{4}{\delta}A + b)\langle\varphi,\varphi\rangle \\ & + a(1+\delta)2^d\langle\nabla\varphi,\nabla\varphi\rangle + (a(1+\tfrac{4}{\delta})\tilde{A} + b2^d)\langle\varphi,\varphi\rangle\} \\ =\ & a'\langle\nabla\varphi,\nabla\varphi\rangle + b'\langle\varphi,\varphi\rangle\end{aligned}$$

wobei $a' = (1+\delta)\, a\, \frac{2^d+1}{2}$ ist und

$$b' = a(1+\tfrac{4}{\delta})\,\frac{A+\tilde{A}}{2} + b\,\frac{2^d+1}{2} \quad .$$

Das bedeutet ζ ist formbeschränkt bezüglich $-\Delta$ mit einer relativen Schranke $\bar{a}$, $\bar{a} \leq a'$.

Da $a > 0$ beliebig klein gewählt werden konnte, kann $a' > 0$ beliebig klein gewählt werden, d.h. ζ ist mit relativer Schranke 0 formbeschränkt. □

Korollar: Ist die symmetrische quadratische Form β lokal und summierbar beschränkt bezüglich $-\Delta$ mit S-Schranke a, so ist $\zeta(\varphi,\psi) = \sum_{i\in Z^d} \beta_{x_i}(\varphi,\psi)$ formbeschränkt mit relativer Schranke $\bar{a} \leq a\,\frac{2^d+1}{2}$.

Der Beweis ergibt sich unmittelbar aus dem Beweis von Satz 3.

Das vorstehende Ergebnis ist natürlich nur für Formen mit S-Schranke 0 völlig befriedigend. Für eine S-Schranke a von β mit $0 < a < 1$ erhält man jedoch nicht immer eine brauchbare relative Schranke von ζ, d.h. die Schranke kann unter Umständen größer als 1 sein.

Verschärft man die Forderung der Lokalität, so erhält man hinsichtlich der Schranken ein befriedigendes Ergebnis.

Wir nennen eine symmetrische, quadratische Form β auf $Q(-\Delta)$ distributiv, wenn für alle $\varphi,\psi \in Q(-\Delta)$ und $\chi \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ gilt:

$\beta(\chi\varphi,\psi) = \beta(\varphi,\overline{\chi}\psi)$ wobei $\overline{\chi}(x) = \overline{\chi(x)}$ die komplexe Konjugation bezeichnet.

Satz 4: Ist die symmetrische quadratische Form β distributiv und summierbar beschränkt bezüglich $-\Delta$ mit S-Schranke a, so ist

$$\zeta(\varphi,\psi) = \sum_{i\in Z^d} \beta_{\chi_i}(\varphi,\psi)$$

formbeschränkt mit relativer Schranke $a' \le a$.

Bew.: Man wähle Funktionen $\{\chi_i\}_{i\in Z^d}$ mit folgenden Eigenschaften:

1") $\chi_i \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$; $0 \le \chi_i(x) \le 1$ für alle $i \in Z^d$ und $x \in \mathbb{R}^d$

2") $\sum_{i\in Z^d} \chi_i(x)^2 = 1$ für alle $x \in \mathbb{R}^d$

3") supp $\chi_i \subset \check{C}_i$

4") $\sup_{x\in\mathbb{R}^d} \sum_{i\in Z^d} |\nabla\chi_i(x)|^2 = \overline{A} < \infty$

Nun gilt:

$$|\zeta(\varphi,\varphi)| \le \sum_{i\in Z^d} |\beta_{\chi_i}(\varphi,\varphi)| = \sum_{i\in Z^d} |\beta_{\chi_i}(\sum_{j\in Z^d} \chi_j^2\varphi,\varphi)|$$

$$\le \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} |\beta_{\chi_i}(\chi_j\varphi,\chi_j\varphi)| \quad \text{(Lemma 2)}$$

$$\le \sum_{i\in Z^d} \sum_{j\in Z^d} a_{j-i} \langle\nabla(\chi_j\varphi),\nabla(\chi_j\varphi)\rangle + b_{j-i}\langle\chi_j\varphi,\chi_j\varphi\rangle$$

$$= a \sum_{j\in Z^d} \langle\nabla(\chi_j\varphi),\nabla(\chi_j\varphi)\rangle + b\langle\chi_j\varphi,\chi_j\varphi\rangle \quad .$$

Ferner

$$\sum_{j\in Z^d} \langle \nabla(\chi_j\varphi),\ \nabla(\chi_j\varphi)\rangle$$

$$= \sum_{j\in Z^d} \langle \chi_j\nabla\varphi, \chi_j\nabla\varphi\rangle \ + \sum_{j\in Z^d} \langle (\nabla\chi_i)\varphi,\ (\nabla\chi_i)\varphi\rangle$$

$$+ \sum_{j\in Z^d} \int_{\mathbb{R}^d} \chi_j(x)\nabla\chi_j(x)\ (\varphi(x)\nabla\overline{\varphi}(x) + \overline{\varphi}(x)\nabla\varphi(x))dx \qquad (*)$$

Aber wegen $\sum_{j\in Z^d} \chi_i(x)^2 = 1$ ist

$$0 = \nabla\Big(\sum_{j\in Z^d} \chi_i(x)^2\Big) = \frac{1}{2} \sum_{j\in Z^d} \chi_i(x)\ \nabla\chi_i(x)$$

Der letzte Summand in (*) verschwindet also.

Es ergibt sich also:

$$|\zeta(\varphi,\varphi)| \ \leq\ a \sum_{j\in Z^d} \langle \chi_j\nabla\varphi, \chi_j\nabla\varphi\rangle \ + a \sum_{j\in Z^d} \langle (\nabla\chi_j)\varphi,\ (\nabla\chi_j)\varphi\rangle$$

$$+ b \sum_{j\in Z^d} \langle \chi_j\varphi,\ \chi_j\varphi\rangle$$

$$= a \sum_{j\in Z^d} \langle \chi_j^2\ \nabla\varphi, \nabla\varphi\rangle \ + a \sum_{j\in Z^d} \langle |\nabla\chi_j|^2\ \varphi, \varphi\ \rangle$$

$$+ b \sum_{j\in Z^d} \langle \chi_j^2\ \varphi, \varphi\rangle$$

$$= a\ \langle \nabla\varphi\ ,\ \nabla\varphi\rangle + (a\,\overline{A} + b)\ \langle \varphi, \varphi\rangle$$

□

Nach diesen Vorbereitungen wenden wir uns wieder stochastischen quadratischen Formen zu.

Wir sind an Formen der Gestalt

$$\zeta_\omega(\varphi,\psi) = \sum_{i\in Z^d} \beta_i(\omega;\ \varphi_{x_i},\ \psi_{x_i}) \qquad (6)$$

interessiert, wobei für festes $\omega\in\Omega$ $\beta_i(\omega;\cdot,\cdot)$ eine quadratische Form ist (vgl. (1)).

Wir nennen eine Menge B von quadratischen Formen gleichmäßig summierbar beschränkt bezüglich $-\Delta$, wenn jedes $\beta \in B$ summierbar beschränkt ist und die Konstanten a_i und b_i (vgl. (2)) unabhängig von β gewählt werden können. Unter der relativen Schranke von B verstehen wir dann das Infimum von $a = \Sigma a_i$ über alle von $\beta \in B$ unabhängigen Konstanten a_i, die (2) erfüllen für alle β.

Satz 5: Sind die quadratischen Formen $\{\beta_i(\omega)\}$ für alle $i \in Z^d$ und fast alle $\omega \in \Omega$ gleichmäßig summierbar beschränkt bezüglich $-\Delta$, so gilt:

a) Sind die Formen $\beta_i(\omega)$ lokal und ist die relative Schranke von $\{\beta_i(\omega)\}$ gleich Null, so ist die Form

$$\zeta_\omega(\varphi,\psi) = \sum_{i \in Z^d} \beta_i(\omega; \varphi_{x_i}, \psi_{x_i})$$

wohldefiniert und infinitesimal beschränkt bezüglich $-\Delta$.

b) Sind die Formen $\beta_i(\omega)$ distributiv und ist die relative Schranke von $\{\beta_i(\omega)\}$ gleich a, so ist ζ_ω relativ beschränkt mit relativer Schranke $a' \leq a$.

Bew.: Die Beweise der Sätze 3 und 4 lassen sich Wort für Wort übertragen. □

Wir beschließen diesen Paragraphen mit einigen Beispielen.

1) Für dieses Beispiel soll die Dimension d = 1 sein. Ein beschränktes Borelmaß μ auf $\mathbb{R}$ definiert durch $\mu(f) = \int_{\mathbb{R}} f(x)\mu(dx)$ eine stetige Linearform auf $C^b(\mathbb{R})$, den stetigen, beschränkten Funktionen auf $\mathbb{R}$, versehen mit der Supremumsnorm: $|f|_\infty = \sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x)|$.

$\beta_\mu(\varphi,\psi) = \mu(\varphi\bar{\psi})$ definiert dann eine symmetrische quadratische Form auf $Q(-\frac{d^2}{dx^2}) = H^1(\mathbb{R}) \subset C^b(\mathbb{R})$. β_μ ist distributiv. Wir zeigen, daß β_μ summierbar beschränkt bezüglich $-\frac{d^2}{dx^2}$ ist mit S-Schranke Null.

Es gilt:

$$|\beta_\mu(\varphi,\varphi)| = |\mu(|\varphi|^2)| \leq |\mu|(\text{supp}\,\varphi) \cdot |\varphi|_\infty^2$$

$$\leq \varepsilon|\mu|(\text{supp}\,\varphi) \langle\varphi',\varphi'\rangle + C_\varepsilon|\mu|(\text{supp}\,\varphi)\cdot\langle\varphi,\varphi\rangle \qquad (7)$$

nach dem Sobolev'schen Einbettungssatz (siehe z.B. Reed-Simon II [53]), wobei $\varepsilon > 0$ beliebig gewählt werden kann.

Aus Gleichung (7) folgt insbesondere, daß β_μ infinitesimal formbeschränkt bezüglich $-\frac{d^2}{dx^2}$ ist, da $|\mu|(\text{supp}\,\varphi) \leq |\mu|(\mathbb{R}) < \infty$ für alle φ gilt.

Ferner gilt, daß für $\text{supp}\,\varphi \subset \tilde{C}_i$ gilt:

$$|\beta_\mu(\varphi,\varphi)| \leq \varepsilon|\mu|(\tilde{C}_i)\langle\varphi',\varphi'\rangle + C_\varepsilon|\mu|(\tilde{C}_i)\langle\varphi,\varphi\rangle \qquad (8)$$

β_μ ist also summierbar beschränkt mit relativer Schranke Null, wenn

$\sum_{i\in\mathbb{Z}^d} |\mu|(\tilde{C}_i) < \infty$ gilt.

Da $|\mu|(\tilde{C}_i) = \sum_{|j-i|\leq 1} |\mu|(C_j)$ gilt, ist:

$$\sum_{i\in\mathbb{Z}^d} |\mu|(\tilde{C}_i) = \sum_{i\in\mathbb{Z}^d} \sum_{|j-i|\leq 1} |\mu|(C_j) \leq 3 \sum_{i\in\mathbb{Z}^d} |\mu_i|(C_i)$$

$$= 3\,|\mu|(\mathbb{R}) < \infty.$$

Daraus erhalten wir mittels Satz 5 die Proposition:

Proposition 2: Gibt es zur Familie $\{\mu_i(\omega)\}_{i\in\mathbb{Z},\omega\in\Omega}$ endlicher Borelmaße auf $\mathbb{R}$ ein positives endliches Borelmaß μ, so daß $|\mu_i(\omega)|(C_j) \leq \mu(C_j)$ fast sicher und für alle $i,j\in\mathbb{Z}$ gilt, so definiert $\zeta_\omega(\varphi,\psi) = \sum_{i\in\mathbb{Z}} \mu_i(\omega)(\varphi_{x_i}\overline{\psi}_{x_i})$ fast sicher eine quadratische Form, die infinitesimal formbeschränkt ist relativ zu $-\frac{d^2}{dx^2}$.

Stochastische Versionen des Kronig-Penney-Potentials mit δ-Wechselwirkung erhält man demnach folgendermaßen:

Sind $\{q_i\}_{i\in Z}$ und $\{\xi_i\}_{i\in Z}$ Familien von Zufallsvariablen so daß $|q_i| < C_1$, $|\xi_i| < C_2$ fast sicher gilt, so setzen wir

$$\mu_i(\omega)(\varphi) = q_i(\omega)\,\delta_{\xi_i(\omega)}(\varphi) = q_i(\omega)\varphi(\xi_i(\omega)).$$

Dann ist also $\zeta_\omega(\varphi,\psi) = \sum_{i\in Z^d} q_i(\omega)\delta_{\xi_i(\omega)}(\varphi\bar{\psi})$ nach Proposition 2 wohldefiniert und der stochastische Operator:

$$H_\omega = -\frac{d^2}{dx^2} + \zeta_\omega$$

als Formsumme fast sicher selbstadjungiert.

Wählt man $\mu_i(\omega) = f_i(\omega)dx$ für Funktionen $f_i(\omega)\in L^1(\mathbb{R},dx)$ für alle $i\in Z$ und fast alle $\omega\in\Omega$, so kann man weitere Beispiele stochastischer Potentiale konstruieren. Dies führen wir jedoch gleich für beliebige Raumdimensionen aus.

2) Nun sei die Raumdimension d wieder beliebig.

Wir wählen $p = 1$ für $d = 1$, $p > \frac{d}{2}$ für $d > 1$ und eine Menge $M \subset l^1(L^p)$, so daß für alle $f\in M$ gilt:

$$\Big(\int_{C_o+x_i} |f|^p dx\Big)^{1/p} \le C_i < \infty$$

und $\sum_{i\in Z^d} C_i < \infty$. Dann ist M gleichmäßig summierbar beschränkt. Folglich ist zu

$$V_\omega(x) = \Sigma f_i(\omega, x-x_i)$$

$f_i(\omega)\in M$ fast sicher, der Schrödingeroperator $H_\omega = -\Delta + V_\omega$ fast sicher wesentlich selbstadjungiert.

Kapitel II: Ergodische Operatoren

§ 5. Motivation der Begriffsbildung

In Kapitel I mußten wir nur schwache Bedingungen an die auftretenden Zufallsvariablen stellen: Ihre Verteilungen sollten kompakte Träger haben oder Momente genügend hoher Ordnung sollten existieren. Für die Untersuchungen in diesem und dem nächsten Kapitel benötigen wir mehr Informationen über diese Zufallsvariablen. Solche Informationen würden sich aus Kenntnissen über den Entstehungsprozeß des ungeordneten Kristalls ergeben. Leider scheinen unsere theoretischen, genauer: aus anerkannten Grundprinzipien exakt hergeleiteten, Kenntnisse über Kristalle sehr begrenzt zu sein. So ist die Existenz von Kristallen eine Erfahrungstatsache, die zur Zeit theoretisch nicht befriedigend erklärt werden kann (vgl. Reed-Simon IV [53] Kap. XIII. 16, p. 311f). Wir können daher nur versuchen, plausible Annahmen über die stochastischen Felder $\{f_i\}_{i\in Z^d}$ zu finden. Dazu gehen wir von der Vorstellung aus, daß der uns interessierende Festkörper durch Abkühlung aus einer Schmelze entsteht. Wir nehmen ferner an, daß die Schmelze - verglichen mit atomaren Dimensionen - praktisch unendlich weit ausgedehnt ist, genauer: den ganzen Raum erfüllt. Dies führt zu der in der Festkörperphysik üblichen Annahme des unendlich ausgedehnten Kristalls.

Außerdem nehmen wir an, daß die Schmelze gut durchmischt ist, so daß an jedem Punkt des Raumes "im Mittel" die gleichen physikalischen Bedingungen herrschen. Dies führt - mathematisch formuliert - zur Annahme der räumlichen Homogenität des stochastischen Feldes $\{f_i\}_{i\in Z^d}$, also

$$P(f_{i_1}\in A_1,\ f_{i_2}\in A_2,\ \dots,\ f_{i_n}\in A_n) = P(f_{i_1+j}\in A_1,\ f_{i_2+j}\in A_2,\ \dots,\ f_{i_n+j}\in A_n) \quad (1)$$

für beliebiges $j\in Z^d$.

In der Regel dürften sich die Teilchen derart beeinflussen, daß die gemeinsame Verteilung von f_i und f_j nicht einfach das Produkt der einzelnen Verteilungen ist, d.h. daß die Zufallsvariablen f_i und f_j nicht unabhängig sind. Es erscheint uns jedoch plausibel, daß sehr weit voneinander entfernte Teilchen sich "beliebig wenig" beeinflussen, mathematisch ausgedrückt:

$$\lim_{|k|\to\infty} P(f_{i_1} \in A_1, \dots, f_{i_n} \in A_n, f_{j_1+k} \in B_1, \dots, f_{j_n+k} \in B_m)$$

$$= P(f_{i_1} \in A_1, \dots, f_{i_n} \in A_n)\, P(f_{j_1} \in B_1, \dots, f_{j_m} \in B_m) \qquad (2)$$

Dies ist eine Ergodizitätsbedingung an das stochastische Feld $\{f_i\}_{i \in Z^d}$: (2) bedeutet, daß das Feld $\{f_i\}$ mischend (im englischen: "mixing") ist (vgl. Lamperti [36] Ch. 5.4).

Uns genügt im folgenden die schwächere Bedingung, daß $\{f_i\}_{i \in Z^d}$ ergodisch ist.

Wir wollen nun den Begriff der Ergodizität definieren. Dazu erinnern wir daran, daß es zu jedem homogenen stochastischen Feld $\{f_i\}_{i \in Z^d}$ ein äquivalentes stochastisches Feld $\{f_i'\}_{i \in Z^d}$ gibt mit der folgenden Eigenschaft:
Es gibt auf dem zugehörigen Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ maßtreue Transformationen $\{T_i\}_{i \in Z^d}$, so daß

$$f_i'(T_j\omega) = f_{i-j}'(\omega) \qquad (3)$$

gilt (vgl. Lamperti [36] , Doob [13]).

Eine Familie $\{T_i\}_{i \in I}$ von maßtreuen Transformationen auf einem Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ heißt ergodisch, wenn jede unter $\{T_i\}_{i \in I}$ invariante Menge $A \in \mathcal{F}$ Wahrscheinlichkeit Null oder Eins hat. Dabei heißt eine Menge unter $\{T_i\}_{i \in I}$ invariant, wenn $T_i^{-1}A = A$ für alle $i \in I$ gilt.
Dazu äquivalent ist die Forderung, daß jede meßbare und beschränkte reell-

wertige Funktion f auf Ω, die unter $\{T_i\}_{i \in I}$ invariant ist, fast sicher konstant sein muß. (Vgl. Reed-Simon I [53] .)

Ein homogenes stochastisches Feld $\{f_i\}$ nennen wir ergodisch oder auch metrisch transitiv, wenn die (gemäß (3)) zugehörigen maßtreuen Transformationen ergodisch sind.

Aus unserer Annahme (2) für ein homogenes stochastisches Feld $\{f_i\}$ folgt die Ergodizität (Lamperti [13]).

Für ein homogenes Gauß'sches Feld folgt die Ergodizität (sogar "mixing")bereits aus dem Verschwinden der Korrelationsfunktion im Unendlichen (siehe z.B. Lòeve [38]).

Die Voraussetzungen der Homogenität und der Ergodizität sind in der Literatur im Zusammenhang mit ungeordneten Systemen in Festkörpern üblich (siehe z.B. Pastur [50], Pastur [52] , Fukushima [20] , Nakao [46], Kunz und Souillard [35]). Insbesondere vergleiche man Pastur's Argumentation in [52] p. 179f.

Wir wollen nun ausrechnen, wie sich der Schrödingeroperator

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, \cdot - x_i) \tag{4}$$

für ein ergodisches Feld $\{f_i\}$ unter $\{T_i\}$ transformiert.

Zunächst gilt:

$$\begin{aligned} V_{T_j\omega}(x) &= \sum_{i \in Z^d} f_i(T_j\omega, x - x_i) \\ &= \sum_{i \in Z^d} f_{i-j}(\omega, x - x_i) \\ &= \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x - x_{i+j}) \\ &= \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x - x_j - x_i) \quad (i \to x_i \text{ ist ein Gruppenhomomorphismus}) \\ &= V_\omega(x - x_j) \, . \end{aligned}$$

Definiert man zu $j \in \mathbb{Z}^d$ den unitären Operator U_j auf $L^2(\mathbb{R}^d)$ durch

$$U_j \varphi(x) = \varphi(x-x_j) \tag{5}$$

so erhält man aus der obigen Rechnung, daß für die Multiplikationsoperatoren V_ω und $V_{T_j\omega}$ gilt:

$$V_{T_j\omega} = U_j V_\omega U_j^* \tag{6}$$

Da der Operator $H_o = -\Delta$ mit U_j kommutiert und $U_j U_j^* = 1$ ist, folgt für die Schrödingeroperatoren:

$$H_{T_j\omega} = U_j H_\omega U_j^* \tag{7}$$

Diese Gleichung bildet den Ausgangspunkt für die Untersuchungen der folgenden Abschnitte.

Mit Hilfe von Gleichung (7) werden wir die Ergodizität von "operatorwertigen Zufallsvariablen" definieren und für solche Operatoren die Unabhängigkeit ihres Spektrums vom Zufall zeigen.

In den Abschnitten § 6 bis § 9 folgen wir teilweise Kirsch und Martinelli [31] .

§ 6. Meßbarkeit und Ergodizität selbstadjungierter Operatoren

In diesem Abschnitt geben wir eine exakte Definition für die Ergodizität selbstadjungierter Operatoren und beginnen mit der Untersuchung ergodischer Operatoren.

Für den Rest der Arbeit sollen alle vorkommenden Hilberträume als separabel vorausgesetzt werden.

Wir benötigen zunächst einen Meßbarkeitsbegriff für (i.a.) unbeschränkte Operatoren im Hilbertraum.

Für beschränkte Operatoren im Banachraum wird Meßbarkeit z.B. in dem Buch von Bharucha-Reid [10] untersucht. Man vergleiche auch die dort angegebene Literatur.

Wir nennen eine Familie $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ von fast sicher selbstadjungierten (i.a. unbeschränkten) Operatoren auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ meßbar, wenn für alle $z \in \mathbb{C}\setminus\mathbb{R}$ die Funktion $\omega\to(z-H_\omega)^{-1}$ schwach meßbar ist, wenn also $\omega \to \langle(z-H_\omega)^{-1}\varphi,\psi\rangle$ für alle $\varphi,\psi \in \mathcal{H}$ meßbar ist.[1] Da die Resolvente $(z-H_\omega)^{-1}$ beschränkt und auf ganz $\mathcal{H}$ definiert ist, ist ihre schwache Meßbarkeit wohldefiniert. Die schwache Meßbarkeit von H_ω selbst ist jedoch nur unter zusätzlichen Voraussetzungen definiert (etwa, daß der Definitionsbereich der H_ω von ω unabhängig ist).

Wir untersuchen Zusammenhänge zwischen der hier definierten Meßbarkeit und der schwachen Meßbarkeit von H_ω in Proposition 5 in diesem Paragraphen und in Anhang 1 zu diesem Kapitel.

Statt von einer meßbaren Familie $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ sprechen wir häufig von einem meßbaren stochastischen Operator H_ω, falls diese griffigere Sprechweise keine Verwechslungen befürchten läßt.

---

[1] Die Resolvente $(z-H_\omega)^{-1}$ ist nur außerhalb einer P-Nullmenge definiert; wir können auf dieser Ausnahmemenge $\langle(z-H_\omega)^{-1}\varphi,\psi\rangle$ z.B. gleich Null setzen.

Die folgende Proposition zeigt, daß die Meßbarkeit des Operators H_ω bereits aus der schwachen Meßbarkeit der Resolvente $(z-H_\omega)^{-1}$ für ein spezielles $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ folgt. Die Proposition ist etwas allgemeiner formuliert, da wir sie später in dieser allgemeineren Form benötigen.

Proposition 3: Sind die Operatoren H_ω fast sicher selbstadjungiert, hat der Punkt z_o für fast alle ω einen Abstand $d(z_o,\sigma(H_\omega))$ vom Spektrum von H_ω, der größer als ein positives a (unabhängig von ω) ist und ist $(z_o-H_\omega)^{-1}$ schwach meßbar, so ist $(z-H_\omega)^{-1}$ schwach meßbar für alle $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$.

Bew.: Die Resolvente $R(z,H_\omega) = (z-H_\omega)^{-1}$ ist analytisch in der Resolventenmenge $\rho(H_\omega)$ und es gilt:

$$R(z,H_\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} (z-z_o)^n R(z_o,H_\omega)^{n+1} \qquad (10)$$

für $|z-z_o| < \|R(z_o,H_\omega)\|^{-1}$ (Weidmann [61] Satz 5.14).

Ist nun $z_o \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, so gilt $\|R(z_o,H_\omega)\| \leq (\mathrm{Im}|z_o|)^{-1}$.
Die Reihe (10) konvergiert also in einer von ω unabhängigen Scheibe.
Für alle z mit $|z-z_o| \leq \mathrm{Im}|z_o|$ ist nach (10) $R(z,H_\omega)$ schwach meßbar. Durch iteriertes Anwenden dieses Verfahrens erhält man, daß $R(z,H_\omega)$ für alle z mit sgn Im z = sgn Im z_o schwach meßbar ist.
Für sgn Im z = - sgn Im z_o gilt sgn Im $\bar{z}$ = sgn Im z, also folgt aus
$\langle (z-H_\omega)^{-1}\varphi,\psi\rangle = \overline{\langle (\bar{z}-H_\omega)^{-1}\psi,\varphi\rangle}$ die schwache Meßbarkeit von $(z-H_\omega)^{-1}$.
Für $z_o \in \mathbb{R}$ gilt $\|R(z_o,H_\omega)\|^{-1} \geq d(z_o,\sigma(H_\omega)) \geq a > 0$.
Auch hier konvergiert die Reihe (10) in einer von ω unabhängigen Scheibe. Folglich gibt es ein $z_1 \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, so daß $(z_1-H_\omega)^{-1}$ schwach meßbar ist. Der erste Teil des Beweises zeigt dann, daß $(z-H_\omega)^{-1}$ für alle $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ schwach meßbar ist.

Eine Eigenschaft unbeschränkter selbstadjungierter Operatoren, wie hier die Eigenschaft der Meßbarkeit, auf die (beschränkten) Resolventen herunterzuspielen, ist in der Theorie der unbeschränkten Operatoren keine ungewöhnliche Methode; man vergleiche etwa die Konvergenzdefinitionen für unbeschränkte Operatoren in Reed-Simon I [53].

Die folgende Proposition zeigt, daß andere naheliegende Definitionen für die Meßbarkeit zum selben Meßbarkeitsbegriff führen: Mit $E_\omega(\lambda)$ bezeichnen wir die Spektralschar von H_ω.

Proposition 4: Ist $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ eine Familie selbstadjungierter Operatoren auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$, so sind die folgenden Aussagen äquivalent:

(i) $\omega \to (z-H_\omega)^{-1}$ ist schwach meßbar für alle $z \in \mathbb{C}\setminus\mathbb{R}$.

(ii) $\omega \to E_\omega(\lambda)$ ist schwach meßbar für alle $\lambda\in\mathbb{R}$.

(iii) $\omega \to e^{itH_\omega}$ ist schwach meßbar für alle $t\in\mathbb{R}$.

(iv) Für jede beschränkte, meßbare Funktion $f: \mathbb{R}\to\mathbb{R}$ ist $\omega \to f(H_\omega)$ schwach meßbar.

Bem.: Wie üblich ist $f(H_\omega)$ durch die Gleichung

$$\langle f(H_\omega)\varphi,\psi\rangle = \int f(\lambda)\, \langle E_\omega(d\lambda)\varphi,\psi\rangle \quad \text{für } \varphi,\psi \in \mathcal{H}$$

definiert.

Bew.: (i) $\Rightarrow$ (ii) Die Spektralschar $E_\omega(\lambda)$ ist gegeben durch:

$$\langle E_\omega(\lambda)\varphi,\psi\rangle = \lim_{\delta\to 0+} \lim_{\varepsilon\to 0+} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\lambda+\delta} \langle [(t-i\varepsilon-H_\omega)^{-1}-(t+i\varepsilon-H_\omega)^{-1}]\varphi,\psi\rangle \, dt$$

(vgl. Weidmann [61] Satz 7.17).

Der Integrand ist stetig in t und nach Voraussetzung meßbar in ω. Folglich ist das Integral in ω meßbar, also auch die Limiten über ε und δ.

(ii) $\Rightarrow$ (iv) Ist f zunächst die charakteristische Funktion des Intervalls]a,b], so ist

$$\langle f(H_\omega)\varphi,\psi\rangle = \int f(\lambda)\,\langle E_\omega(d\lambda)\varphi,\psi\rangle = \langle (E_\omega(b)-E_\omega(a))\varphi,\psi\rangle$$

Man zeigt leicht, daß das Mengensystem $\mathcal{A} = \{A \in \mathcal{B}(\mathbb{R});\ \omega \to \int \chi_A(\lambda)\,\langle E_\omega(d\lambda)\varphi,\psi\rangle$ ist meßbar für alle $\varphi,\psi \in \mathcal{H}\}$ eine σ-Algebra ist. Da $\mathcal{A}$ die Intervalle]a,b] enthält, folgt $\mathcal{A} = \mathcal{B}(\mathbb{R})$.

Also ist $\chi_A(H_\omega)$ für beliebige $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ meßbar. Nun sei $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ eine beliebige beschränkte, meßbare Funktion. Dann ist f punktweiser Limes von Treppenfunktion $f_n \leq f$. Also gilt:

$$\int f(\lambda)\,\langle E_\omega(d\lambda)\varphi,\psi\rangle = \lim_{n\to\infty} \int f_n(\lambda)\,\langle E_\omega(d\lambda)\varphi,\psi\rangle$$

nach dem Satz von der majorisierten Konvergenz.

Da $f_n(x) = \Sigma \alpha_{n,i}\,\chi_{A_{n,i}}(x)$ ist $\int f_n(\lambda)\,\langle E_\omega(d\lambda)\varphi,\psi\rangle$ meßbar, also auch der Limes.

(iv) $\Rightarrow$ (iii) ist trivial.

(iii) $\Rightarrow$ (iv) folgt aus:

$$\langle (z-H_\omega)^{-1}\varphi,\psi\rangle = -i \int_0^\infty e^{izt}\,\langle e^{-iH_\omega t}\varphi,\psi\rangle\,dt \quad \text{für Im } z > 0$$

und

$$\langle (z-H_\omega)^{-1}\varphi,\psi\rangle = i \int_0^\infty e^{-izt}\,\langle e^{iH_\omega t}\varphi,\psi\rangle\,dt \quad \text{für Im } z < 0$$

(vgl. z.B. Lamperti [36]).

In beiden Fällen folgt die Meßbarkeit der Integrale aus der Stetigkeit der Integranden in t und deren Meßbarkeit in ω. $\square$

Die nächste Proposition zeigt, daß Meßbarkeit und schwache Meßbarkeit für beschränkte Operatoren übereinstimmen. Um dies zeigen zu können, brauchen wir das folgende einfache, aber nützliche Lemma:

Lemma 3: Sind A_ω und B_ω schwach meßbare, beschränkte Operatoren, so ist auch $A_\omega \cdot B_\omega$ schwach meßbar.

Bew.: Wir wählen eine Orthonormalbasis $\{e_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ des Hilbertraumes $\mathcal{H}$. Dann gilt:

$$\langle A_\omega B_\omega \varphi,\psi\rangle = \langle B_\omega \varphi\,,\, A_\omega^*\psi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{N}} \langle B_\omega\varphi,e_n\rangle \langle e_n,A_\omega^*\psi\rangle$$

$$= \sum_{n\in\mathbb{N}} \langle B_\omega\varphi,e_n\rangle \langle A_\omega e_n,\psi\rangle \quad \text{für alle } \varphi,\psi \in \quad .$$

Da A_ω und B_ω schwach meßbar sind, ist der letzte Ausdruck als Grenzwert meßbarer Funktionen selbst meßbar. □

Proposition 5: Ist die Familie $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ fast sicher (f.s.) selbstadjungierter, beschränkter Operatoren schwach meßbar, so ist sie meßbar.

Bew.: Aus dem Lemma folgt, daß H_ω^n für alle $n\in\mathbb{N}$ meßbar ist, also gilt das gleiche für Polynome $P(H_\omega) = \sum_{n=0}^{N} a_n H_\omega^n$. Die Polynome liegen aber dicht in der Menge aller stetigen Funktionen von H_ω (in der Normtopologie) (siehe z.B. Reed-Simon I [53]).

Folglich ist $f(H_\omega)$ schwach meßbar für alle stetigen Funktionen f.

Da also insbesondere die Operatoren e^{itH_ω} schwach meßbar sind, folgt aus Proposition 4 die Behauptung. □

Wir werden uns in § 9 noch einmal mit der Meßbarkeit von stochastischen selbstadjungierten Operatoren beschäftigen. Insbesondere werden wir dort zeigen, daß die in Kapitel I untersuchten Operatoren $H_\omega = -\Delta + V_\omega = -\Delta + \sum_{i\in\mathbb{Z}^d} f_i(\omega,\cdot - x_i)$ meßbar sind, falls die f_i in ω und x simultan meßbar sind. Die beiden Anhänge

zu diesem Kapitel beschäftigen sich ebenfalls mit der Meßbarkeit von Operatoren. Im Anhang 1 zeigen wir - allerdings unter starken Voraussetzungen - ein Analogon zu Proposition 5 für den Fall unbeschränkter Operatoren. Im Anhang 2 zeigen wir die Meßbarkeit gewisser Projektionsoperatoren $P(\omega)$, die mit meßbaren selbstadjungierten Operatoren H_ω verknüpft sind. Diese Ergebnisse benötigen wir in Satz 7.

Wir wenden uns nun dem Studium ergodischer Operatoren zu, dem Hauptgegenstand dieses Kapitels.

Wir nennen eine meßbare Familie $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ f.s. selbstadjungierter Operatoren auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ ergodisch, wenn es auf Ω eine ergodische Familie $\{T_i\}_{i\in I}$ von maßtreuen Abbildungen gibt und auf $\mathcal{H}$ eine Familie $\{U_i\}_{i\in I}$ von unitären Operatoren, so daß

$$H_{T_i\omega} = U_i H_\omega U_i^* \qquad (1)$$

für alle $i\in I$ und $\omega\in\Omega$ gilt.

Beispiele für ergodische Operatoren wurden bereits in § 5 gegeben, weitere werden in § 10 folgen.

Zum Nachweis der Ergodizität stoch. Operatoren sind die folgenden beiden Propositionen nützlich:

Proposition 6: Ist $\{H_\omega\}$ eine meßbare Familie von selbstadjungierten Operatoren und $\mathcal{D}_{o,\omega}$ für fast alle $\omega\in\Omega$ ein determinierender Bereich (engl.: core) für H_ω, so folgt aus der Gültigkeit von Gleichung (1) für $H_\omega|\mathcal{D}_{o,\omega}$ bereits die Gültigkeit für H_ω.

Bem.: In Anlehnung an Weidmann's Terminologie (vgl. [61]) nennen wir $\mathcal{D}_o \subset \mathcal{D}(H)$ einen determinierenden Bereich für den abgeschlossenen Operator H, wenn der Abschluß des Operators $H|\mathcal{D}_o$ gleich H ist.

Bew.: $\mathcal{D}_\omega$ bezeichne den Definitionsbereich von H_ω.

Zu $f \in \mathcal{D}_{T_i\omega}$ existiert eine Folge $f_n \in \mathcal{D}_{o,T_i\omega}$, so daß $f_n \to f$ und $H_{T_i\omega} f_n \to H_{T_i\omega} f$ konvergieren, da $\mathcal{D}_{o,T_i\omega}$ ein determinierender Bereich ist.

Nach Voraussetzung gilt: $H_{T_i\omega} f_n = U_i H_\omega U_i^* f_n$, also gilt:

$$H_\omega (U_i^* f_n) = U_i^* H_{T_i\omega} f_n \to U_i^* H_{T_i\omega} f .$$

Da H_ω abgeschlossen ist, folgt hieraus und aus $U_i^* f_n \to U_i^* f$,

daß

$$U_i^* H_{T_i\omega} f = H_\omega U_i^* f,$$

also

$$H_{T_i\omega} f = U_i H_\omega U_i^* f \quad \text{gilt.} \ \square$$

Proposition 7: Ist $\{H_\omega\}$ eine meßbare Familie f.s. selbstadjungierter Operatoren und $Q_{o,\omega}$ für fast alle $\omega \in \Omega$ ein determinierender Bereich für die zu H_ω gehörige quadratische Form (engl. form core), so folgt aus $Q_{o,T_i\omega} = U_i Q_{o,\omega}$ und $\langle H_{T_i\omega}\varphi,\psi\rangle = \langle H_\omega U_i^*\varphi, U_i^*\psi\rangle$ (im Sinne von Formen) für $\varphi,\psi \in Q_{o,T_i\omega}$, daß die Familie $\{H_\omega\}$ ergodisch ist.

Bew.: Ist Q_ω der Abschluß von $Q_{o,\omega}$ bezüglich der zu H_ω gehörigen quadratischen Form, so gilt:

$$Q_{T_i\omega} = U_i Q_\omega \text{ und } \langle H_{T_i\omega}\varphi,\psi\rangle = \langle H_\omega (U_i^*\varphi), (U_i^*\psi)\rangle$$

im Sinne von Formen auf $Q_{T_i\omega}$, da die U_i unitär sind. Folglich stimmen die zu $H_{T_i\omega}$ und $U_i H_\omega U_i^*$ gehörigen Formen überein, folglich auch die Operatoren. $\square$

§ 7. Unabhängigkeit des Spektrums ergodischer Operatoren vom Zufall

In diesem Abschnitt zeigen wir, daß das Spektrum von ergodischen Operatoren nicht vom Zufall abhängt, d.h. daß es eine Teilmenge Σ von $\mathbb{R}$ gibt, so daß für fast alle $\omega \in \Omega$ gilt: $\sigma(H_\omega) = \Sigma$. Das gleiche gilt für das Punktspektrum, das diskrete Spektrum, das wesentliche Spektrum, das stetige, singulär- und absolutstetige Spektrum.

Ein wesentliches Hilfsmittel für die Beweise ist die folgende Proposition:

Proposition 8: Ist $\{H_\omega\}_{\omega \in \Omega}$ eine ergodische Familie f.s. selbstadjungierter Operatoren auf $\mathcal{H}$, so gibt es eine Teilmenge Ω_o von Ω vom Maß eins, so daß für alle rationalen Zahlen $\lambda, \mu \in Q$, $\lambda \geq \mu$ gilt: $\dim (R(E_\omega(\lambda) - E_\omega(\mu)))$ hat für alle $\omega \in \Omega_o$ den gleichen Wert (möglicherweise $+\infty$).

Bem.: $R(T)$ bezeichnet das Bild von $\mathcal{H}$ unter dem Operator T.

Bew.: Setze $f_{\lambda,\mu}(\omega) = \dim (R(E_\omega(\lambda) - E_\omega(\mu)))$.
Wir zeigen, daß $f_{\lambda,\mu}$ eine meßbare Funktion ist, die unter allen Transformationen T_i, $i \in I$ invariant ist, d.h.: $f_{\lambda,\mu}(T_i\omega) = f_{\lambda,\mu}(\omega)$.
Meßbare, invariante Funktionen sind aber fast sicher konstant (siehe z.B. Reed-Simon I [53]).
Es gibt also eine Menge $\Omega_{\lambda,\mu} \subset \Omega$ mit $P(\Omega_{\lambda,\mu}) = 1$, so daß $f_{\lambda,\mu}(\omega) = C_{\lambda,\mu}$ für alle $\omega \in \Omega_{\lambda,\mu}$. Wir setzen dann $\Omega_o = \bigcap_{\lambda,\mu \in Q} \Omega_{\lambda,\mu}$. Dann gilt $P(\Omega_o) = 1$ und $f_{\lambda,\mu}(\omega) = C_{\lambda,\mu}$ für alle $\omega \in \Omega_o$ und alle $\lambda, \mu \in Q$.

Wir zeigen zunächst, daß $f_{\lambda,\mu}$ invariant ist unter T_i:
Für einen Projektionsoperator P gilt $\dim R(P) = \operatorname{tr} P$ wobei tr die Spur eines Operators bezeichnet.

Also gilt:

$$f_{\lambda,\mu}(\omega) = \dim(R(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\mu))) = \mathrm{tr}(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\mu)).$$

Folglich:

$$\begin{aligned} f_{\lambda,\mu}(T_i\omega) &= \mathrm{tr}(E_{T_i\omega}(\lambda)-E_{T_i\omega}(\mu)) \\ &= \mathrm{tr}(U_iE_\omega(\lambda)U_i^* - U_iE_\omega(\mu)U_i^*) \\ &= \mathrm{tr}(U_i(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\mu))U_i^*) \\ &= \mathrm{tr}(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\mu)) \\ &= f_{\lambda,\mu}(\omega). \end{aligned}$$

Hierbei haben wir benutzt, daß aus $H_{T_i\omega} = U_iH_\omega U_i^*$ folgt, daß $E_{T_i\omega}(\lambda)=U_iE_\omega(\lambda)U_i^*$ gilt (siehe z.B. Weidmann [61] Satz 7.15 in Verbindung mit der Eindeutigkeit der Spektralschar). Es bleibt noch die Meßbarkeit von $f_{\lambda,\mu}$ zu zeigen: Dazu sei $\{e_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ eine Orthonormalbasis des Hilbertraumes $\mathcal{H}$. Da H_ω ergodisch, also insbesondere meßbar ist, folgt aus Proposition 4, daß $\omega \to \langle E_\omega(\lambda)e_n,e_n\rangle$ meßbar ist, also auch:

$$f_{\lambda,\mu}(\omega) = \mathrm{tr}(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\mu)) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \langle (E_\omega(\lambda)-E_\omega(\mu))\, e_n,e_n\rangle \,. \qquad \square$$

Mit Hilfe der Proposition 8 können wir nun leicht den folgenden Satz zeigen:

Satz 6: Ist $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ eine ergodische Familie f.s. selbstadjungierter Operatoren, so gilt:

(i) Es gibt eine Menge $\Sigma \subset \mathbb{R}$, so daß

$\Sigma = \sigma(H_\omega)$ für P-fast alle $\omega\in\Omega$ gilt.

(ii) Es gibt eine Menge $\Sigma_{ess}\subset\mathbb{R}$, so daß

$\Sigma_{ess} = \sigma_{ess}(H_\omega)$ für P-fast alle $\omega\in\Omega$ gilt.

(iii) Es gibt eine Menge $\Sigma_{dis}\subset\mathbb{R}$, so daß

$\Sigma_{dis} = \sigma_{dis}(H_\omega)$ für P-fast alle $\omega\in\Omega$ gilt.

Wie üblich verstehen wir unter dem diskreten Spektrum $\sigma_{dis}(H)$ eines Operators H die Menge aller isolierten Eigenwerte endlicher Vielfachheit des Operators H. Das wesentliche Spektrum $\sigma_{ess}(H)$ ist dann das Komplement von $\sigma_{dis}(H)$ im Spektrum $\sigma(H)$.

Bew.: (i) $\lambda \in \sigma(H_\omega) \Leftrightarrow \forall_{\varepsilon>0} E_\omega(\lambda+\varepsilon)-E_\omega(\lambda-\varepsilon) \neq 0$ (vgl. Weidmann [61] Satz 7.22)

$$\Leftrightarrow \forall_{\lambda',\lambda'' \in Q, \lambda''<\lambda<\lambda'} E_\omega(\lambda')-E_\omega(\lambda'') \neq 0$$

$$\Leftrightarrow \forall_{\lambda',\lambda'' \in Q, \lambda''<\lambda<\lambda'} f_{\lambda',\lambda''}(\omega) = \dim(R(E_\omega(\lambda')-E_\omega(\lambda''))) \neq 0$$

Aber $f_{\lambda',\lambda''}$ ist nach Proposition 8 fast sicher unabhängig von ω, also ist auch $\lambda \in \sigma(H_\omega)$ fast sicher unabhängig von ω.

(ii) $\lambda \in \sigma_{ess}(H_\omega) \Leftrightarrow \forall_{\varepsilon>0} \dim(R(E_\omega(\lambda+\varepsilon) - E_\omega(\lambda-\varepsilon))) = \infty$

(vgl. Weidmann [61] Satz 7.24)

$$\Leftrightarrow \forall_{\lambda',\lambda'' \in Q, \lambda''<\lambda<\lambda'} f_{\lambda',\lambda''}(\omega) = \infty$$

Wie oben folgt, daß $\lambda \in \sigma_{ess}(H_\omega)$ unabhängig von ω ist.

(iii) folgt aus (i) und (ii) wegen $\sigma_{dis}(H_\omega) = \sigma(H_\omega) \setminus \sigma_{ess}(H_\omega)$. □

Um ein analoges Ergebnis für andere Teile des Spektrums zu zeigen, benötigen wir eine Proposition, die wir jedoch erst im Anhang 2 zu diesem Kapitel beweisen werden.

Wir bezeichnen mit $\mathcal{H}^\omega_{pp}$ die Menge aller $\varphi \in \mathcal{H}$, für die das Maß $\langle E_\omega(d\lambda)\varphi,\varphi\rangle$ ein Punktmaß (im englischen: pure point) ist, mit $\mathcal{H}^\omega_c$ ($\mathcal{H}^\omega_{ac}, \mathcal{H}^\omega_{sin}$) entsprechend die Menge aller $\varphi \in \mathcal{H}$, für die $\langle E_\omega(d\lambda)\varphi,\varphi\rangle$ stetig (bzw. absolut stetig, bzw. singulär stetig) ist. (Vgl. Reed-Simon I [53] und Weidmann [61]).

Die Mengen $\mathcal{H}^\omega_{pp}, \mathcal{H}^\omega_c, \mathcal{H}^\omega_{ac}, \mathcal{H}^\omega_{sin}$ sind unter H_ω invariante Teilräume von $\mathcal{H}$, so daß es sinnvoll ist zu definieren:

$\sigma_{pp}(H_\omega) = \sigma(H_\omega|_{\mathcal{H}_{pp}^\omega})$; $\sigma_c(H_\omega) = \sigma(H_\omega|_{\mathcal{H}_c^\omega})$; $\sigma_{ac}(H_\omega) = \sigma(H_\omega|_{\mathcal{H}_{ac}^\omega})$

und $\sigma_{sin}(H_\omega) = \sigma(H_\omega|_{\mathcal{H}_{sin}^\omega})$.

Reed und Simon I [35] definieren: $\sigma_{pp}(A) = \{\lambda; \lambda \text{ ist ein Eigenwert von } A\}$, so daß $\sigma_{pp}(A)$ in unserer Definition gerade der Abschluß von $\sigma_{pp}(A)$ in Reed-Simons Definition ist. Wir wollen die Menge der Eigenwerte von A statt dessen mit $\varepsilon(A)$ bezeichnen.

Die Projektionsoperatoren auf die Räume $\mathcal{H}_{pp}^\omega, \mathcal{H}_c^\omega$ usw. bezeichnen wir mit $P_{pp}(\omega)$, $P_c(\omega)$ usw.

Wir können nun das benötigte Resultat aus Anhang 2 formulieren:

Proposition 9: Ist $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ eine meßbare Familie f.s. selbstadjungierter Operatore auf $\mathcal{H}$, so sind die folgenden Abbildungen schwach meßbar:

(i) $\omega \to P_{pp}(\omega)$

(ii) $\omega \to P_c(\omega)$

(iii) $\omega \to P_{ac}(\omega)$

(iv) $\omega \to P_{sin}(\omega)$.

Bew.: siehe Anhang 2.

Wir zeigen nun:

Satz 7: Ist $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ eine ergodische Familie f.s. selbstadjungierter Operatoren, so gilt:

(i) Es gibt eine Menge $\Sigma_{pp}\subset\mathbb{R}$, so daß $\Sigma_{pp} = \sigma_{pp}(H_\omega)$ für P-fast alle $\omega\in\Omega$ gilt.

(ii) Es gibt eine Menge $\Sigma_c\subset\mathbb{R}$, so daß $\Sigma_c = \sigma_c(H_\omega)$ für P-fast alle $\omega\in\Omega$ gilt.

(iii) Es gibt eine Menge $\Sigma_{ac}\subset\mathbb{R}$, so daß $\Sigma_{ac} = \sigma_{ac}(H_\omega)$ für P-fast alle $\omega\in\Omega$ gilt.

(iv) Es gibt eine Menge $\Sigma_{sin}\subset\mathbb{R}$, so daß $\Sigma_{sin} = \sigma_{sin}(H_\omega)$ für P-fast alle $\omega\in\Omega$ gil

Bew.: Wegen $\sigma_{pp} = \sigma \setminus \sigma_c$ und $\sigma_{sin} = \sigma_c \setminus \sigma_{ac}$ folgen (i) und (iv) aus (ii), (iii) und Satz 6.

Es genügt also, (ii) und (iii) zu zeigen.

Dazu betrachten wir die Operatoren $H_c^\omega = H_\omega \restriction_{\mathcal{H}_c^\omega} = H_\omega P_c(\omega)$ und

$H_{ac}^\omega = H_\omega \restriction_{\mathcal{H}_{ac}^\omega} = H_\omega P_{ac}(\omega)$.

H_ω^c und H_ω^{ac} sind selbstadjungierte Operatoren auf den Hilberträumen $\mathcal{H}_c^\omega$ bzw. $\mathcal{H}_{ac}^\omega$ (vgl. Weidmann [61] Satz 7.28).

Ihre Spektralscharen sind gegeben durch

$$E_\omega^c(\lambda) = E_\omega(\lambda)P_c(\omega) \text{ bzw. } E_\omega^{ac}(\lambda) = E_\omega(\lambda)P_{ac}(\omega).$$

Wie in Satz 6 können wir auf die Unabhängigkeit der Spektren $\sigma(H_\omega^c)$ und $\sigma(H_\omega^{ac})$ schließen, wenn wir Meßbarkeit und Inwarianz der Funktionen $f_{\lambda,\mu}^c(\omega) = \mathrm{tr}(E_\omega^c(\lambda) - E_\omega^c(\mu))$ und $f_{\lambda,\mu}^{ac}(\omega) = \mathrm{tr}(E_\omega^{ac}(\lambda) - E^{ac}(\mu))$ zeigen können.

Die schwache Meßbarkeit von $E_\omega^c(\lambda) = E_\omega(\lambda)P_c(\omega)$ und $E_\omega^{ac}(\lambda) = E_\omega(\lambda)P_{ac}(\omega)$ folgt aus der schwachen Meßbarkeit von $E_\omega(\lambda)$ (Proposition 4) und der schwachen Meßbarkeit von $P_c(\omega)$ bzw. $P_{ac}(\omega)$ (Proposition 9) mit Hilfe von Lemma 3.

Wir zeigen nun, daß P_ω^c und P_ω^{ac} ergodische Familien bilden. Die Gleichungen $P_{T_i\omega}^c = U_i P_\omega^c U_i^*$ und $P_{T_i\omega}^{ac} = U_i P_\omega^{ac} U_i^*$ folgen aus:

$$\mathcal{H}_c^{T_i\omega} = U_i \mathcal{H}_c^\omega \text{ bzw. } \mathcal{H}_{ac}^{T_i\omega} = U_i \mathcal{H}_{ac}^\omega \quad .$$

Dies sieht man so:

$$\begin{aligned}
\varphi \in \mathcal{H}_c^{T_i\omega} &\Leftrightarrow \lambda \to \langle E_{T_i\omega}(\lambda)\varphi, \varphi\rangle \text{ ist stetig.} \\
&\Leftrightarrow \lambda \to \langle U_i E_\omega(\lambda) U_i^* \varphi, \varphi\rangle \text{ ist stetig.} \\
&\Leftrightarrow \lambda \to \langle E_\omega(\lambda) U_i^* \varphi, U_i^* \varphi\rangle \text{ ist stetig.} \\
&\Leftrightarrow U_i^* \varphi \in \mathcal{H}_c^\omega \quad .
\end{aligned}$$

Analog für den absolut stetigen Fall.

Demnach gilt: $E^c_{T_i\omega}(\lambda) = E_{T_i\omega}(\lambda)P_c(T_i\omega)$

$= U_i E_\omega(\lambda)U_i^* \; U_i P_c(\omega)U_i^* = U_i E_\omega(\lambda)P_c(\omega)U_i^*$

$= U_i E^c_\omega(\lambda)U_i^*$

und analoges für $E^{ac}_\omega(\lambda)$.

Wir haben also gezeigt, daß $f^c_{\lambda,\mu}$ und $f^{ac}_{\lambda,\mu}$ meßbare, invariante Funktionen sind. Wie in Satz 6 kann man daraus auf die fast sichere Konstanz der Spektren $\sigma_c(H_\omega)$ und $\sigma_{ac}(H_\omega)$ schließen. □

Wir bemerken noch, daß aus unseren Sätzen nicht auf die Konstanz des Eigenwertspektrums $\varepsilon(H_\omega)$ geschlossen werden kann. Aus Satz 7 folgt lediglich, daß $\overline{\varepsilon(H_\omega)} = \sigma_{pp}(H_\omega)$ unabhängig vom Zufall ist.(*) In § 11 werden wir uns genauer mit dem Eigenwertspektrum beschäftigen und an einem Beispiel zeigen, daß $\varepsilon(H_\omega)$ i.a. stark von ω abhängt. Daraus folgt dann auch, daß es i.a. keine Menge Ω_1 vom Maß Eins gibt, so daß $f_{\lambda,\mu}(\omega) = \dim(R(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\mu))$ für $\omega\in\Omega_1$ und alle reellen Zahlen λ,μ konstant ist.

(*) $\overline{A}$ bezeichnet den Abschluß der Menge A.

§ 8. Das diskrete Spektrum ergodischer Operatoren

Wir wenden uns nun den isolierten Eigenwerten endlicher Vielfachheit von ergodischen Operatoren zu.

Genauer: Wir suchen ein Kriterium dafür, daß solche Eigenwerte mit Wahrscheinlichkeit Eins nicht existieren.

Ohne weitere Voraussetzung ist dies natürlich falsch, wie das folgende triviale Beispiel zeigt: $\Omega = \{\omega_o\}$, $\{T_i\}_{i\in\{i_o\}} := \{T_{i_o}\}$ $T_{i_o} = \mathrm{id}|_\Omega$; $H_{\omega_o} := H$.

Dann ist T_{i_o} trivialerweise ergodisch, und $H_{T_i\omega_o} = H_{\omega_o} = H$. Wählt man für H einen Operator mit isolierten Eigenwerten endlicher Vielfachheit, so hat H_{ω_o} mit Wahrscheinlichkeit Eins solche Eigenwerte.

Dieses Beispiel ist natürlich sehr pathologisch und entspricht nicht den Vorstellungen, die man sich von ergodischen Operatoren macht. Die Pathologie liegt darin, daß Ω, $\{T_i\}_{i\in I}$ und $\{U_i\}_{i\in I}$ zu "arm" sind. Dies wird durch die folgende Bedingung ausgeschlossen.

Wir nennen eine Familie $\{U_i\}_{i\in I}$ von unitären Operatoren in $\mathcal{H}$ vollständig, wenn es eine unendliche Teilmenge J von I gibt, so daß die Menge

$$A_J := \{\varphi \in \mathcal{H} \; ; \; \langle U_{j_1}^* \varphi, \, U_{j_2}^* \varphi \rangle = 0 \text{ für alle } j_1 \neq j_2 \text{ aus } J\}$$

in $\mathcal{H}$ total ist, d.h. daß der von A_J aufgespannte Vektorraum in $\mathcal{H}$ dicht liegt.

Bem.: Da $\mathcal{H}$ als separabel vorausgesetzt war, muß J abzählbar sein.

Beispiel: $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ und $U_i\varphi(x) = \varphi(x-x_i)$ wobei $\{x_i\}$ ein Gitter ist.

Wählen wir $J = I$ so gilt: $A_I \supset \{\varphi \in C_o^\infty ; \operatorname{supp}\varphi \subset (C_o)^o + x_i \text{ für ein } i \in Z^d\}$.

Der von A_I aufgespannte Vektorraum enthält also

$$C_o^\infty(\mathbb{R}^d \setminus \{x_i\}) = \{\varphi \in C_o^\infty ; \operatorname{supp}\varphi \subset \mathbb{R}^d \setminus \{x_i\}\} \; .$$

Dieser Raum ist aber dicht in $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Die $\{U_i\}$ bilden gerade die Familie unitärer Operatoren, die zu den in § 5 erwähnten ergodischen Operatoren gehört.

Mittels dieser Begriffsbildung erhalten wir folgendes Ergebnis:

Proposition 10: Ist $\{P_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ eine ergodische Familie von Projektionsoperatoren[1] und ist die Familie $\{U_i\}_{i\in I}$ der zugehörigen unitären Operatoren vollständig, so gilt:

$$\dim R(P_\omega) = \infty \text{ mit Wahrscheinlichkeit Eins}$$

oder $$P_\omega = 0 \text{ mit Wahrscheinlichkeit Eins.}$$

Bew.: $\dim R(P_\omega) = \operatorname{tr} P_\omega$ ist fast sicher konstant, da $\operatorname{tr} P_\omega$ meßbar und invariant unter $\{T_i\}_{i\in I}$ ist (vgl. Proposition 8 und Satz 6).

Also ist $\operatorname{tr} P_\omega$ fast sicher gleich dem Erwartungswert $E(\operatorname{tr} P_\omega)$. Nach Voraussetzung gibt es eine abzählbar unendliche Menge $J\subset I$, etwa $J = \{j_n\}_{n\in\mathbb{N}}$, so daß $A_J = \{\varphi \in \mathfrak{H} ; \langle U_{j_n}^* \varphi, U_{j_m}^* \varphi\rangle = 0 \text{ für alle } n \neq m\}$ eine totale Menge ist.

Wir wählen ein $\varphi\in A_J$, so daß $\langle\varphi,\varphi\rangle = 1$ ist.

Dann ist $\varphi_n := U_{j_n}^* \varphi$ ein Orthonormalsystem in $\mathfrak{H}$.

Also gilt:

$$\operatorname{tr} P_\omega \geq \sum_{n=1}^{N} \langle P_\omega \varphi_n, \varphi_n\rangle$$

da P_ω ein positiver Operator ist.

Folglich ist

$$\operatorname{tr} P_\omega = E(\operatorname{tr} P_\omega) \geq \sum_{n=1}^{\infty} E(\langle P_\omega \varphi_n, \varphi_n\rangle) \text{ fast sicher.}$$

Aber

$$E(\langle P_\omega \varphi_n, \varphi_n\rangle) = E(\langle P_\omega U_{j_n}^* \varphi, U_{j_n}^* \varphi\rangle) = E(\langle U_{j_n} P_\omega U_{j_n}^* \varphi, \varphi\rangle)$$

$$= E(\langle P_{T_{j_n}\omega} \varphi, \varphi\rangle) = E(\langle P_\omega \varphi, \varphi\rangle)$$

da T_{j_n} maßtreu ist.

---

[1] Darunter verstehen wir immer orthogonale Projektoren.

Also gilt entweder $E(\langle P_\omega \varphi, \varphi \rangle) = 0$ für alle $\varphi \in A_J$ oder $\operatorname{tr} P_\omega = \infty$ fast sicher.

Ist $E(\langle P_\omega \varphi, \varphi \rangle) = 0$ für alle $\varphi \in A_J$, so folgt $\langle P_\omega \varphi, \varphi \rangle = 0$ fast sicher. Da A_J total ist, folgt daraus jedoch $\langle P_\omega \psi, \psi \rangle = 0$ fast sicher für alle $\psi \in \mathcal{H}$. Dann ist $\operatorname{tr} P_\omega = 0$. Es gilt also entweder $\operatorname{tr} P_\omega = \infty$ fast sicher oder $\operatorname{tr} P_\omega = 0$ fast sicher. □

Man erhält daraus den folgenden Satz:

Satz 8: Ist $\{H_\omega\}_{\omega \in \Omega}$ eine ergodische Familie f.s. selbstadjungierter Operatoren und ist die zugehörige Familie $\{U_i\}_{i \in I}$ unitärer Operatoren vollständig, so ist das diskrete Spektrum von H_ω fast sicher leer.

Bew.: Wir nehmen an $\Sigma_{dis} \neq \emptyset$ (Notation von Satz 6), etwa $\lambda \in \Sigma_{dis}$. Dann existiert ein $\varepsilon > 0$, so daß $[\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon] \cap \Sigma = \emptyset$, da λ isoliert ist. $P_\omega := E_\omega(\lambda+\varepsilon) - E_\omega(\lambda-\varepsilon)$ ist dann der Projektor auf den Eigenraum zum Eigenwert λ. Andererseits ist P_ω ein ergodischer Operator, also folgt aus Proposition 10: $\dim R(P_\omega) = 0$ fast sicher oder $\dim R(P_\omega) = \infty$ fast sicher. Da λ ein Eigenwert ist, ist $\dim R(P_\omega) \neq 0$ fast sicher. Also gilt $\dim R(P_\omega) = \infty$ fast sicher. D.h. der Eigenwert ist fast sicher unendlichfach entartet, gehört also im Widerspruch zur Annahme nicht zu Σ_{dis}. Also ist Σ_{dis} mit Wahrscheinlichkeit Eins leer. □

Eine ähnliche Argumentation werden wir in § 11 dazu benutzen, um zu zeigen, daß ein gegebenes $\lambda \in \mathbb{R}$ fast sicher nicht zum Eigenwertspektrum $\varepsilon(H_\omega)$ gehört. Anders als im vorstehenden Satz 8 für Σ_{dis} können wir jedoch nicht schließen, daß $\varepsilon(H_\omega)$ fast sicher leer ist, da $\varepsilon(H_\omega)$ ein Gegensatz zu $\sigma_{dis}(H_\omega)$ nicht fast sicher konstant ist.

§ 9. Meßbare selbstadjungierte Operatoren

In diesem Kapitel werden wir zeigen, daß Schrödingeroperatoren mit stochastischen Potentialen unter schwachen Voraussetzungen an das Potential eine meßbare Familie im Sinne der Definition in § 6 bilden. Nützlich dazu ist der folgende Satz:

Satz 9: Sind $\{A_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ und $\{B_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ meßbare Familien f.s. selbstadjungierter Operatoren und ist $A_\omega + B_\omega$ auf $\mathcal{D}(A_\omega) \cap \mathcal{D}(B_\omega)$ fast sicher wesentlich selbstadjungiert, so ist $\{A_\omega + B_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ eine meßbare Familie selbstadjungierter Operatoren.

Bew.: Wir zeigen, daß $e^{it(A_\omega+B_\omega)}$ für alle t schwach meßbar in ω ist. Aus Proposition 4 folgt dann, daß die Familie $\{A_\omega + B_\omega\}$ meßbar ist.

Nach der Trotterformel gilt:

$$e^{it(A_\omega+B_\omega)} = s\text{-}\lim_{n\to\infty} (e^{i\frac{t}{n}A_\omega} e^{i\frac{t}{n}B_\omega})^n$$

wobei s-lim den starken Grenzwert bezeichnet.

(Für die Trotterformel siehe z.B. Reed-Simon I [53]).

Da A_ω und B_ω meßbar sind, folgt aus Proposition 4 die schwache Meßbarkeit von e^{it/nA_ω} und e^{it/nB_ω} und daraus folgt die schwache Meßbarkeit von $e^{i\frac{t}{n}A_\omega} \cdot e^{i\frac{t}{n}B_\omega}$ nach Lemma 3 sowie die schwache Meßbarkeit von $(e^{i\frac{t}{n}A_\omega} e^{i\frac{t}{n}B_\omega})^n$, also die schwache Meßbarkeit des Limes. □

Als Korollar erhalten wir:

Korollar: Ist $V(\omega,x) = V_\omega(x)$ als Funktion auf $\Omega \times \mathbb{R}^d$ meßbar und für fast alle ω als Funktion auf $\mathbb{R}^d$ lokal quadratintegrierbar, so gilt:

Ist $H_\omega = -\Delta + V_\omega$ wesentlich selbstadjungiert auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, so ist $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ meßbar.

Bew.: Die Bedingung $V_\omega \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^d)$ bewirkt, daß der Multiplikationsoperator V_ω auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ wohldefiniert ist.

Die Operatoren e^{itV_ω} sind ebenfalls Multiplikationsoperatoren:

$$(e^{itV_\omega}\varphi)(x) = e^{itV_\omega(x)}\varphi(x) .$$

Da die Funktion $V(\omega,x)$ auf $\Omega\times\mathbb{R}^d$ meßbar ist, gilt dies auch für die Funktion $e^{itV(\omega,x)}$, also gilt:

$$\omega \to \int_{\mathbb{R}^d} e^{itV(\omega,x)}\varphi(x)\overline{\psi(x)}\,dx = \langle e^{itV_\omega}\varphi,\psi\rangle$$

ist meßbar (vgl. z.B. Bauer [8]), d.h. der Operator e^{itV_ω} ist schwach meßbar. Da der (von ω unabhängige) Operator $-\Delta$ trivialerweise meßbar ist, folgt aus Satz 9 die Behauptung. □

Aus dem Korollar und den Sätzen 1 und 2 folgt, daß die in § 2 und § 3 untersuchten Operatoren meßbar sind, wenn die Funktionen $f_i(\omega,x)$ in ω und x simultan meßbar sind.

Wie zu erwarten ist, bleibt die Meßbarkeit erhalten, wenn man in einem vernünftigen Sinne zu Grenzwerten übergeht:

Proposition 11: Bilden die selbstadjungierten Operatoren $T_\omega^{(n)}$ für jedes $n\in\mathbb{N}$ meßbare Familien und konvergieren die Operatoren $T_\omega^{(n)}$ für $n\to\infty$ und fast alle $\omega\in\Omega$ im Sinne der starken Resolventenkonvergenz gegen einen selbstadjungierten Operator T_ω, so ist die Familie $\{T_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ meßbar.

Bem.: Für Definition und Eigenschaften der starken Resolventenkonvergenz siehe Reed-Simon I [53].

Bew.: Ist $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, so gilt: $\langle (z-T_\omega)^{-1}\varphi,\psi\rangle = \lim_{n\to\infty} \langle (z-T_\omega^{(n)})^{-1}\varphi,\psi\rangle$ da aus der starken Konvergenz der Resolventen die schwache Konvergenz der Resolventen folgt; da nach Voraussetzung $\langle (z-T_\omega^{(n)})^{-1}\varphi,\psi\rangle$ für jedes $\varphi,\psi \in \mathcal{H}$ meßbar ist, ist auch der Grenzwert, d.h. $\langle (z-T_\omega)^{-1}\varphi,\psi\rangle$ meßbar, also ist $\{T_\omega\}$ meßbar. □

Dieser Satz ist nützlich für Schrödingeroperatoren die nur als Grenzwerte von Operatoren der Form $-\Delta + V$ definiert sind, Beispiele findet man z.B. in Albeverio und Høegh-Krohn [3]; Albeverio, Høegh-Krohn und Streit [4] , Albeverio, Gesztesy und Høegh-Krohn [2] , Herbst und Sloan [26] .

Schließlich wollen wir noch Schrödingeroperatoren, die als Formsummen definiert sind, auf Meßbarkeit untersuchen.

Wir nennen eine Familie $\{q_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ von symmetrischen quadratischen Formen schwach meßbar auf einem Unterraum Q_o von $\mathcal{H}$, wenn $Q(q_\omega) \supset Q_o$ fast sicher und für alle $\varphi,\psi \in Q_o$ gilt:

$\omega \to q_\omega(\varphi,\psi)$ ist meßbar.

Satz 10: Ist die Familie $\{q_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ quadratischer Formen schwach meßbar auf $Q(-\Delta)$ und ist q_ω für fast alle $\omega\in\Omega$ formbeschränkt bezüglich $-\Delta$ mit Schranken $a_\omega \le a < 1$ und $b_\omega \le b < \infty$, so sind die Operatoren $H_\omega = -\Delta + q_\omega$ meßbar.

Bew.: Wir lehnen uns in der Terminologie an Herbst und Sloan [26] an. Für Beweise der benutzten Sätze siehe Simon [57].

Wir setzen $H_o = -\Delta$ und $R_o^{1/2}(\lambda) = (H_o-\lambda)^{-1/2}$ für $\lambda < 0$. Mit $\mathcal{H}_{+1}$ bezeichnen wir die Formdomäne von H_o versehen mit dem Skalarprodukt

$\langle f,g\rangle_{+1} = \langle f,g\rangle + \langle \nabla f, \nabla g\rangle$

$\mathcal{H}_{+1}$ ist ein Hilbertraum , $\mathcal{H}_{-1}$ bezeichne den Dualraum von $\mathcal{H}_{+1}$. Man kann dann

L^2 als Teilraum von $\mathcal{H}_{-1}$ auffassen, also $\mathcal{H}_{+1} \subset L^2 \subset \mathcal{H}_{-1}$.

$R_o^{1/2}(\lambda)$ ist ein beschränkter Operator von L^2 auf $\mathcal{H}_{+1}$, folglich ist der zu $R_o^{1/2}(\lambda)$ adjungierte Operator ein beschränkter Operator von $\mathcal{H}_{-1}$ auf L^2. (Wir identifizieren den Hilbertraum L^2 mit seinem Dualraum.) Da $R_o^{1/2}(\lambda)$ symmetrisch ist, setzt der adjungierte Operator $R_o^{1/2}(\lambda)$ fort, wir bezeichnen daher den adjungierten Operator ebenfalls mit $R_o^{1/2}(\lambda)$.

Ist nun q eine bezüglich H_o beschränkte quadratische Form mit Konstanten a und b, so ist $q: \mathcal{H}_{+1} \times \mathcal{H}_{+1} \to \mathbb{C}$ eine beschränkte Sesquilinearform. Ihr entspricht ein beschränkter linearer Operator $\tilde{q}: \mathcal{H}_{+1} \to \mathcal{H}_{-1}$ vermöge $q(f,g) = (\tilde{q}f,g)$, wobei (l,φ) die Anwendung der Linearform l auf den Vektor φ bedeutet.

Folglich können wir $T_q(\lambda) = R_o^{1/2}(\lambda)\tilde{q}R_o^{1/2}(\lambda)$ als beschränkten Operator in L^2 auffassen.

Die Resolvente von H_o+q läßt sich nun schreiben als:

$$(H_o+q-\lambda)^{-1} = (H_o-\lambda)^{-1/2}(1+(H_o-\lambda)^{-1/2}\tilde{q}(H_o-\lambda)^{-1/2})^{-1}(H_o-\lambda)^{-1/2}$$

$$= (H_o-\lambda)^{-1/2}(1 + T_q(\lambda))^{-1}(H_o-\lambda)^{-1/2}$$

falls $(1+T_q(\lambda))$ invertierbar ist. Dies ist bekanntlich dann der Fall, wenn die Operatornorm $\|T_q(\lambda)\|$ kleiner als Eins ist. Für $\lambda > b$ (wir hatten $|q(\varphi,\varphi)| \leq \langle(aH_o+b)\varphi,\varphi\rangle$ vorausgesetzt) gilt:

$$\|T_q(\lambda)\| \leq \|(H_o-\lambda)^{-1}\| \cdot \|q\| \leq \frac{1}{\lambda} b < 1 .$$

Für $\lambda > b$ gilt also

$$(H_o+q_\omega-\lambda)^{-1} = (H_o-\lambda)^{-1/2}(1+T_{q_\omega}(\lambda))^{-1}(H_o-\lambda)^{-1/2} .$$

Wegen $\|T_{q_\omega}(\lambda)\| < 1$ ist $(1+T_{q_\omega}(\lambda))^{-1}$ eine beschränkte, meßbare Funktion von $T_{q_\omega}(\lambda)$, ist also meßbar, wenn $T_{q_\omega}(\lambda)$ meßbar ist. Da $T_{q_\omega}(\lambda)$ beschränkt ist, genügt es hierzu die schwache Meßbarkeit von $T_{q_\omega}(\lambda)$ zu zeigen (Proposition 5).

Es ist $\langle T_{q_\omega}(\lambda)\varphi,\psi\rangle = q_\omega((H_o-\lambda)^{-1/2}\varphi, (H_o-\lambda)^{-1/2}\psi)$ für $\varphi,\psi \in L^2$.
Da $(H_o-\lambda)^{-1/2}\varphi$ und $(H_o-\lambda)^{-1/2}\psi$ in $\mathcal{H}_{+1}$ liegen, folgt die Meßbarkeit der rechten Seite nach Voraussetzung. Also ist $(H_o+q_\omega-\lambda)^{-1}$ schwach meßbar. Nach Proposition 3 folgt hieraus die Meßbarkeit von H_o+q_ω. □

Damit haben wir also auch die Meßbarkeit der in § 4 (speziell Satz 5) untersuchten Operatoren $H_\omega = -\Delta + \sum_{i\in Z^d} \beta_i(\omega;\cdot-x_i)$ gezeigt, unter der Voraussetzung, daß die $\beta_i(\omega)$ schwach meßbar sind.

§ 10. Beispiele für ergodische Operatoren

In diesem Abschnitt geben wir eine Reihe von Beispielen für ergodische Operatoren.

1) Den Ausgangspunkt für unsere Untersuchung ergodischer Operatoren bildeten Schrödingeroperatoren mit Potentialen der Gestalt

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-x_i) \tag{1}$$

(vgl. insbesondere § 5).

Aus den Ergebnissen der Abschnitte §§ 5,6 und 9 ergibt sich, daß solche Operatoren unter bestimmten Voraussetzungen ergodisch sind. Wir fassen dies noch einmal in der folgenden Proposition zusammen:

Proposition 12: Ist das $L^p(l^1)$-wertige stochastische Feld[1] $\{f_i\}_{i \in Z^d}$ ergodisch, f_i für alle $i \in Z^d$ als Funktion auf $\Omega \times R^d$ meßbar und für fast alle $\omega \in \Omega$

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, \cdot - x_i) \tag{2}$$

auf $C_o^\infty(R^d)$ wohldefiniert und wesentlich selbstadjungiert, so ist die Familie $\{H_\omega\}$ selbstadjungierter Operatoren ergodisch. Die Familie der zugehörigen unitären Operatoren $\{U_i\}$ ist vollständig.

Der Beweis ergibt sich unmittelbar aus Gleichung (7) in § 5, Proposition 6 in § 6 und dem Korollar zu Satz 9 in § 9.
Kriterien für die wesentliche Selbstadjungiertheit von H_ω wurden in § 2 und § 3 entwickelt.
Aus den Abschnitten §§ 6-9 wissen wir also, daß Operatoren, die den Voraussetzungen der Proposition 12 genügen, fast sicher von ω unabhängiges Spektrum

---

[1] $p = 2$ für $d \leq 3$, $p > 2$ für $d = 4$, $p \geq \frac{d}{2}$ für $d \geq 5$

(Punktspektrum, stetiges Spektrum usw.) haben. Insbesondere enthält das Spektrum fast sicher keine isolierten Eigenwerte endlicher Vielfachheit. Für den Fall der Dimension d = 1 folgt hieraus bereits, daß (2) fast sicher überhaupt keine isolierten Eigenwerte hat, da (2) dann nur Eigenwerte endlicher Vielfachheit hat (siehe z.B.: Neumark [47]).

Zur Erläuterung gehen wir noch auf ein spezielles Beispiel ein.
Dazu sei $f \in L^p(1^1)$ (p wie zuvor) und $\{q_i\}_{i \in Z^d}$ ein ergodisches, reellwertiges stochastisches Feld. Ist $|q_i(\omega)| \leq C$ fast sicher, so ist

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} q_i(\omega) f(x-x_i) \tag{3}$$

ein ergodischer stochastischer Operator. Insbesondere ist $f_i(\omega,x) = q_i(\omega)f(x)$ wegen der Produktgestalt in (ω,x) simultan meßbar.
Sind die $\{q_i\}$ z.B. unabhängig und identisch verteilt, so bilden sie ein ergodisches stochastisches Feld (vgl. Lòeve [38]).
Nach den Resultaten aus § 3 ist H_ω auch dann wesentlich selbstadjungiert, wenn $f \in L^q(1^1)$ liegt ($q > 2$ für $d \leq 4$, $q > \frac{d}{2}$ für $d \geq 4$) und Momente genügend hoher Ordnung von q_o existieren. Hier kann man für $\{q_i\}$ z.B. ein homogenes Gauß'sches Feld wählen, dessen Korrelationsfunktion im Unendlichen verschwindet. Ein solches stochastisches Feld ist ergodisch (vgl. Lòeve [38]) und alle Momente sind endlich.

2) In § 4 betrachteten wir quadratische Formen

$$\zeta_\omega(\varphi,\psi) = \sum_{i \in Z^d} \beta_i(\omega;\varphi_{x_i},\psi_{x_i}) \tag{4}$$

Wir nennen eine schwach meßbare Familie $\{\beta_i(\omega)\}$ von quadratischen Formen auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ ergodisch, wenn es auf Ω ergodische Transformationen $\{T_i\}$

gibt, so daß gilt

$$\beta_i(T_j\omega) = \beta_{i-j}(\omega) \tag{5}$$

Damit gilt:

$$\begin{aligned}\zeta_{T_j\omega}(\varphi,\psi) &= \sum_{i\in Z^d} \beta_i(T_j\omega,\varphi_{x_i},\psi_{x_i}) \\ &= \sum_{i\in Z^d} \beta_{i-j}(\omega,\varphi_{x_i},\psi_{x_i}) \\ &= \sum_{i\in Z^d} \beta_i(\omega,\varphi_{x_{i+j}},\psi_{x_{i+j}}) \\ &= \zeta_\omega(\varphi_{x_j},\psi_{x_j}) \ .\end{aligned}$$

Und daraus folgt wiederum die Ergodizität des Operators

$$H_\omega = -\Delta + \zeta_\omega \tag{6}$$

vorausgesetzt, daß ζ_ω formbeschränkt ist mit gleichmäßigen Schranken $a < 1$ und $b < \infty$. (vgl. § 4 und § 9). Ein wichtiges Beispiel hierfür sind stochastische Versionen des Kronig-Penney-Potentials (periodische δ-Potential), nämlich

$$\zeta_\omega = \sum_{i\in Z^d} q_i(\omega)\delta_{x_i} \tag{7}$$

wobei $\{q_i\}_{i\in Z^d}$ ein ergodisches stochastisches Feld mit $|q_i(\omega)| \leq C$ ist und δ_{x_i} das im Punkt x_i konzentrierte Maß der Masse Eins ist. Die Formbeschränktheit von ζ_ω folgt aus § 4, da δ_{x_i} distributiv, infinitesimal formbeschränkt ist und kompakten Träger hat. Die Meßbarkeit folgt aus § 9 und die Ergodizität aus den obigen Überlegungen.

3) In einer Reihe von Arbeiten (siehe z.B.: Pastur [50], Pastur [51], Nakao [46], Fukushima [29], Molchanov, Goldsh'eid und Pastur [23], Molchanov [42],

Molchanov [43] werden Schrödingeroperatoren betrachtet, deren Potential $V(\omega,x)$ selbst ein ergodisches stochastisches Feld auf $\mathbb{R}^d$ bildet, d.h. es gibt ergodische Transformationen $\{T_y\}_{y\in\mathbb{R}^d}$ im Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega,\mathcal{F},P)$, so daß

$$V(T_y\omega,x) = V(\omega,x-y) \tag{8}$$

(vgl. Pastur [50]). Die Potentiale unserer bisherigen Beispiele sind nicht ergodisch in diesem Sinne.

Wir wollen zeigen, daß die oben beschriebenen Schrödingeroperatoren unter gewissen Voraussetzungen ergodisch sind. Dazu bezeichne $V^+(\omega,x)=\max(0,V(\omega,x))$, $V^-(\omega,x) = \max(0,-V(\omega,x))$.

Proposition 13: Ist das stochastische Feld $V(\omega,x)$ auf $\mathbb{R}^d$ meßbar und homogen und g

$$E(|V^+(\omega,0)|^2) < \infty$$

und

$$E(|V^-(\omega,0)|^k) < \infty$$

mit $k=3$ für $d\leq 2$, $k=4$ für $d = 3$ und $k = d$ für $d\geq 4$, so ist der Schrödingeroperato $H_\omega = -\Delta + V(\omega,\cdot)$ auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ fast sicher wesentlich selbstadjungiert.

Ist V außerdem ergodisch, so ist $\{H_\omega\}$ eine ergodische Familie. Die zugehörige Familie unitärer Operatoren ist vollständig.

Bew.: Zunächst wenden wir Satz 2 und die Satz 2 folgende Bemerkung an.

Da V homogen ist, gilt:

$$E\Big(\int_{C_0+x_i} |V_\omega^+(x)|^2dx\Big) = \int_{C_0+x_i} E(|V_\omega^+(x)|^2)dx$$

$$= E(|V^+(\omega,0)|^2)\ |C_0| < \infty, \text{ wobei } |C_0| \text{ das Lebesguemaß von } C_0 \text{ bezeichnet.}$$

Ferner gilt mit $q=2,9$ für $d\leq 2$, $q=3,9$ für $d=3$ und $q=d$ für $d\geq 4$ und k wie in der Behauptung des Satzes

$$E\Big(\Big|\Big(\int_{C_0+x_i} |V_\omega^-(x)|^q dx\Big)^{1/q}\Big|^k\Big) \leq E\Big(C\cdot \int_{C_0+x_i} |V_\omega^-(x)|^k dx\Big)$$

$$\leq C\cdot \int_{C_0+x_i} E(|V_\omega^-(x)|^k)dx \leq \tilde{C}\ E(|V^-(\omega,0)|^k) < \infty\ .$$

Durch Ausrechnen weist man nach, daß k die Bedingung (5) aus Satz 2 erfüllt.

Folglich ist H_ω fast sicher wesentlich selbstadjungiert.

Definiert man $U_y\varphi(x) = \varphi(x-y)$ so folgt aus (8) daß für die Multiplikationsoperatoren $V(T_y\omega,\cdot)$ und $V(\omega,\cdot)$ gilt:

$$V(T_y\omega,\cdot) = U_y V(\omega,\cdot)U_y^* \tag{9}$$

Da der Operator $H_o = -\Delta$ mit den unitären Operatoren U_y, $y\in\mathbb{R}^d$, kommutiert, gilt:

$$H_{T_y\omega} = U_y H_\omega U_y^* \tag{10}$$

H_ω ist also ergodisch. Die Familie $\{U_y\}_{y\in\mathbb{R}^d}$ ist vollständig, da bereits die Teilfamilie $\{U_{x_i}\}_{i\in Z^d}$ vollständig ist. □

Die Operatoren H_ω haben also fast alle das gleiche Spektrum, (Punktspektrum, stetige Spektrum usw.). Sie haben mit Wahrscheinlichkeit Eins keine isolierten Eigenwerte endlicher Vielfachheit.

4) In Pastur [52], Fukushima, Nagai und Nakao [21], Fukushima [19], Kunz und Souillard [35] und zahlreichen weiteren Arbeiten wird eine Diskretisierung des Beispiels 3) betrachtet. D.h. : Es werden Operatoren

$$H_\omega = -\Delta_d + V_\omega \tag{11}$$

auf $l^2(Z^d)$ untersucht, wobei Δ_d definiert ist durch:

$$\Delta_d\varphi(i) = \sum_{|i-j|=1} \varphi(j) - 2d\varphi(i) \tag{12}$$

und V_ω ein ergodisches stochastisches Feld auf Z^d ist.
Da der Operator Δ_d auf $l^2(Z^d)$ beschränkt ist, ist

H_ω auf $\mathcal{D}(V_\omega) = \{\varphi\in l^2(Z^d);\ \sum_{i\in Z^d} |V_\omega(i)\varphi(i)|^2 < \infty\}$

selbstadjungiert. Der Operator V_ω ist meßbar, da

$$\cdot \mapsto \langle e^{itV_\omega}\varphi,\varphi\rangle = \sum_{j\in Z^d} e^{itV_\omega(j)}\varphi(j)\,\overline{\varphi(j)} \quad \text{für alle } \varphi\in l^2(Z^d)$$

meßbar ist. Aus Satz 9 folgt dann, daß H_ω meßbar ist.

Ist $U_j\varphi(i) = \varphi(i-j)$, so gilt wegen der Ergodizität von V_ω

$$V_{T_j\omega} = U_j V_\omega U_j^* \tag{13}$$

also wegen $U_j\Delta_d U_j^* = \Delta_d$:

$$H_{T_j\omega} = U_j H_\omega U_j^* \tag{14}.$$

H_ω ist also ergodisch und die unitären Operatoren $\{U_j\}$ sind vollständig.

Weitere Beispiele ergodischer Operatoren wurden in Kirsch und Martinelli [31] diskutiert.

In § 12 werden wir Schrödingeroperatoren mit fastperiodischen Potentialen als ein weiteres Beispiel für ergodische Operatoren untersuchen.

§ 11. Einige Bemerkungen zum Eigenwertspektrum

In diesem Kapitel kommen wir auf die Ausführungen am Schluß von § 7 über die Menge der Eigenwerte von ergodischen Operatoren zurück. Zunächst zeigen wir, daß ein festes $\lambda \in \mathbb{R}$ fast sicher ein Eigenwert ist oder fast sicher kein Eigenwert ist:

Proposition 14: Ist die Familie $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ selbstadjungierter Operatoren ergodisch, so ist eine (feste) Zahl $\lambda\in\mathbb{R}$ mit Wahrscheinlichkeit Eins oder mit Wahrscheinlichkeit Null ein Eigenwert von H_ω. Die Dimension des Eigenraumes zu λ ist fast sicher konstant. Sind die zu $\{H_\omega\}$ gehörigen Operatoren $\{U_i\}_{i\in I}$ vollständig, so ist die Dimension des Eigenraumes fast sicher Unendlich oder Null.

Bew.: Wir definieren $P_\omega^\lambda := \text{s-lim}_{\varepsilon\to 0} E_\omega(\lambda+\varepsilon)-E_\omega(\lambda-\varepsilon)$,

wobei s-lim den starken Operatorgrenzwert bezeichnet. λ ist genau dann ein Eigenwert von H_ω, wenn $P_\omega^\lambda \neq 0$ ist und die Dimension des Eigenraumes zu λ ist gleich

$$\dim R(P_\omega^\lambda) = \operatorname{tr} P_\omega^\lambda.$$

Da die Operatoren $E_\omega(\mu)$ für jedes μ ergodisch sind, ist auch P_ω^λ ergodisch, folglich gilt:

$$\dim R(P^\lambda_{T_i\omega}) = \operatorname{tr} P_\omega^\lambda = \operatorname{tr}(U_i P_\omega^\lambda U_i^*) = \operatorname{tr} P_\omega^\lambda = \dim R(P_\omega^\lambda).$$

Die Dimension des Eigenraumes zu λ ist also eine meßbare, unter $\{T_i\}$ invariante Funktion, also fast sicher konstant. Sind die $\{U_i\}$ vollständig, so folgt aus Proposition 10, daß $\dim R(P_\omega^\lambda)$ fast sicher Null oder Unendlich ist. □

Für den Fall der Raumdimension d = 1 ergibt sich daraus:

Korollar: Ist $H_\omega = -\frac{d^2}{dx^2} + V_\omega(x)$; $V_\omega \in L^1_{loc}(\mathbb{R})$ fast sicher, ist H_ω ergodisch und sind die zugehörigen unitären Operatoren vollständig, so ist jedes $\lambda \in \mathbb{R}$ fast sicher kein Eigenwert von H_ω.

Bew.: Das Korollar folgt aus Proposition 14, da die betrachteten Operatoren H_ω keine Eigenwerte unendlicher Vielfachheit besitzen (vgl. Neumark [47]). □

In allen Beispielen in § 10 waren die unitären Operatoren $\{U_i\}$ vollständig. Jeder Wert $\lambda \in \mathbb{R}$ ist also mit Wahrscheinlichkeit Eins kein Eigenwert endlicher Vielfachheit, in den Fällen des Korollars (also bei d = 1) sogar kein Eigenwert.

In § 8 hatten wir gezeigt, daß es (in den Beispielen in § 10) fast sicher keine isolierten Eigenwerte endlicher Vielfachheit gibt. Hier haben wir gezeigt, daß es zu jedem $\lambda \in \mathbb{R}$ eine Menge $\Omega_\lambda \subset \Omega$ vom Maß Eins gibt, so daß λ für alle H_ω, $\omega \in \Omega_\lambda$ kein Eigenwert endlicher Vielfachheit ist . Daraus können wir nicht (!) folgern, daß es mit Wahrscheinlichkeit Eins keine Eigenwerte endlicher Vielfachheit gibt. Zwar hat für alle $\omega \in \bigcap_{\lambda \in \mathbb{R}} \Omega_\lambda$ der Operator H_ω keine Eigenwerte endlicher Vielfachheit, die Menge $\bigcap_{\lambda \in \mathbb{R}} \Omega_\lambda$ hat jedoch im allgemeinen nicht Maß Eins.

Im folgenden Beispiel gilt in der Tat $P(\bigcap_{\lambda \in \mathbb{R}} \Omega_\lambda) = 0$.

In [23] zeigten Goldsheid, Molchanov und Pastur, daß für eine Klasse stochastischer Potentiale V_ω der eindimensionale Schrödingeroperator fast sicher reines Punktspektrum hat.

Bezeichnet $\varepsilon(H_\omega)$ die Menge der Eigenwerte von H_ω, so gilt also $\sigma(H_\omega) = \sigma_{pp}(H_\omega) = \overline{\varepsilon(H_\omega)}$ fast sicher.

Ähnliche Operatoren wurden von Kunz und Souillard [35] angegeben.

Man vergleiche auch Molchanov [42] für eine Verbesserung des Ergebnisses von [23] .

Die von Goldsheid, Molchanov und Pastur untersuchten Potentiale V_ω sind ergodische stationäre Prozesse auf $\mathbb{R}$, ferner gilt $0 \leq V_\omega(x) \leq 1$. Die Operatoren gehören also zu unserer Beispielklasse § 10: 3); sie erfüllen also insbesondere die Voraussetzungen von Proposition 14 und dem anschließenden Korollar.

Goldsheid, Molchanov und Pastur geben an, daß $\sigma(H_\omega)$ fast sicher die Halbachse $[0,\infty[$ ist.

Wir haben also hier folgende Situation vorliegen:

1) Fast jeder Operator H_ω hat eine in $[0,\infty[$ dichte Menge von Eigenwerten.

2) Jede Zahl $\lambda \in \mathbb{R}$ ist Eigenwert für fast keinen Operator H_ω (d.h. nur für ω aus einer Nullmenge).

Also ist $\sigma(H_\omega) = \sigma_{pp}(H_\omega) = \overline{\varepsilon(H_\omega)}$ fast sicher unabhängig von ω, $\varepsilon(H_\omega)$ hängt jedoch stark von ω ab. Zu jedem $\omega_o \in \Omega$ findet man eine Menge Ω_o vom Maß Eins, so daß $\varepsilon(H_{\omega_o}) \cap \varepsilon(H_\omega) = \emptyset$ für alle $\omega \in \Omega_o$. Dies folgt aus dem Korollar zu Proposition 14, da $\varepsilon(H_{\omega_o})$ abzählbar ist.

§ 12. Schrödingeroperatoren mit fastperiodischen Potentialen

In diesem Abschnitt diskutieren wir einige Anwendungen unserer Ergebnisse auf Schrödingeroperatoren mit fastperiodischen Potentialen. Für Details und weiterführende Untersuchungen verweisen wir auf die umfangreiche Literatur über dieses Gebiet, insbesondere auf Avron und Simon [7], Bellissard und Testard [9] und dort angegebene Literatur.
Zunächst stellen wir kurz einige Definitionen und Ergebnisse bezüglich fastperiodischer Funktionen zusammen. Wir folgen dabei dem Appendix 1 in Avron und Simon [7] .

Wir bezeichnen mit $C_b = C_b(\mathbb{R}^d)$ den Banachraum aller stetigen und beschränkten reellwertigen Funktionen auf $\mathbb{R}^d$ versehen mit der Supremumsnorm. Zu $f \in C_b$ bezeichne f_y die durch $f_y(x) = f(x-y)$ definierte Funktion.
Eine Funktion $f \in C_b(\mathbb{R}^d)$ heißt fastperiodisch, wenn die Menge $\{f_y;\ y \in \mathbb{R}^d\}$ in C_b kompakten Abschluß hat. Die Menge $\Omega_f = \overline{\{f_y;\ y \in \mathbb{R}^d\}}$ heißt die Hülle von f. Beispiele für fastperiodische Funktionen sind stetige periodische Funktionen und Linearkombinationen stetiger periodischer Funktionen. So ist z.B. die Funktion $f(x) = \cos x + \cos \pi x$ auf $\mathbb{R}$ fastperiodisch, aber nicht periodisch.

Auf $\{f_y;\ y \in \mathbb{R}^d\}$ operiert die Gruppe $\mathbb{R}^d$ vermöge $T_z f_y = f_{y+z}$ durch Isometrien (bzgl. der Supremumsnorm). Mittels Stetigkeitsargumenten kann man die Gruppenoperation auf Ω_f fortsetzen.

Die Menge $\{f_y;\ y \in \mathbb{R}^d\}$ ist selbst eine Gruppe bezüglich der Verknüpfung o definiert durch $f_y \, o \, f_z = f_{y+z}$. Die Gruppenstruktur überträgt sich ebenfalls durch Grenzwertbildung auf Ω_f.

Die Menge Ω_f versehen mit dieser Gruppenstruktur und der von C_b induzierten Topologie ist eine kompakte topologische Gruppe. Folglich gibt es auf Ω_f ein Haarmaß μ_f, das wir durch $\mu_f(\Omega_f) = 1$ normieren können.

Bezeichnet $\mathfrak{B}(\Omega_f)$ das System der Borelmengen auf Ω_f, so ist $(\Omega_f, \mathfrak{B}(\Omega_f), \mu_f)$ ein Wahrscheinlichkeitsraum. Die Transformationen $\{T_y\}_{y\in\mathbb{R}^d}$ bilden eine Gruppe von ergodischen Transformationen auf Ω_f.

Mit Hilfe dieser Begriffsbildungen definieren wir nun ergodische Familien selbstadjungierter Operatoren.

Ist $\varphi\in\Omega_f$, so bezeichne V_φ - zur besseren Unterscheidung - den Multiplikationsoperator mit der Funktion φ auf $L^2(\mathbb{R}^d)$. Da $V_\varphi(x) := \varphi(x)$ in beiden Variablen stetig ist, ist die Funktion insbesondere simultan in φ und x meßbar. Da ferner V_φ beschränkt ist, ist

$$H_\varphi = -\Delta + V_\varphi \tag{1}$$

auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ wesentlich selbstadjungiert. Es folgt, daß $\{H_\varphi\}_{\varphi\in\Omega_f}$ eine meßbare Familie ist.

Definieren wir für eine Funktion $h\in L^2(\mathbb{R}^d)$ die Operatoren $\{U_y\}_{y\in\mathbb{R}^d}$ durch

$$U_y h(x) = h(x-y),$$

so gilt

$$V_{T_y\varphi} = U_y V_\varphi U_y^* \tag{2}$$

und folglich

$$H_{T_y\varphi} = U_y H_\varphi U_y^* \tag{3}$$

Die Familie $\{H_\varphi\}_{\varphi\in\Omega_f}$ ist also eine ergodische Familie selbstadjungierter Operatoren. Die zugehörigen unitären Operatoren $\{U_y\}_{y\in\mathbb{R}^d}$ sind vollständig, wie wir bereits in § 10 gesehen hatten. Aus den Ergebnissen der Abschnitte § 7

und § 8 ergibt sich also: Die Spektren der Operatoren H_φ haben für fast alle $\varphi \in \Omega_f$ das gleiche Spektrum (Punktspektrum, absolutstetiges Spektrum usw.) und leeres diskretes Spektrum.

Im vorliegenden Fall können wir jedoch wegen der speziellen Struktur des Beispiels noch mehr aussagen, nämlich "fast alle" durch "alle" ersetzen:

Proposition 15: Ist f eine fastperiodische Funktion, so ist das Spektrum von $H = -\Delta + V$ für alle V in der Hülle Ω_f von f gleich und enthält keine isolierten Eigenwerte endlicher Vielfachheit. Insbesondere hat $H = -\Delta + f$ keine isolierten Eigenwerte endlicher Vielfachheit und im Falle der Raumdimension d = 1 überhaupt keine isolierten Eigenwerte.

Bew.: $\Omega_o \subset \Omega_f$ sei eine Menge vom Maß Eins, so daß für alle $\varphi \in \Omega_o$ gilt: $\sigma(H_\varphi) = \Sigma$ und $\sigma_{dis}(H_\varphi) = \emptyset$ und $\psi \in \Omega_f$ sei ein beliebiges Element aus der Hülle von f.

Da das Haarmaß μ_f als Träger die ganze Gruppe Ω_f hat, liegt jede Menge vom Maß Eins dicht in Ω_f.

Wir finden also Funktionen $\psi_n \in \Omega_o$, die in der Topologie von Ω_f, also gleichmäßig, gegen ψ konvergieren. Folglich konvergieren die Schrödingeroperatoren H_{ψ_n} gegen H_ψ in der Norm-Resolventenkonvergenz (vgl. Reed-Simon I [53]).

Daraus folgt, daß $\sigma(H_\psi) = \lim_{n\to\infty} \sigma(H_{\psi_n}) = \Sigma$ gilt

(wobei $\lim_{n\to\infty} A_n = \{x;\ x = \lim_{n\to\infty} x_n \text{ mit } x_n \in A_n\}$.)

Ist $\lambda \in \sigma_{dis}(H_\psi)$, so wäre also λ ein isolierter Eigenwert für alle H_{ψ_n}. Da $\sigma_{dis}(H_{\psi_n}) = \emptyset$ für alle $n \in \mathbb{N}$, wäre λ ein isolierter Eigenwert unendlicher Vielfachheit. P_n bzw. P bezeichne die Projektionen auf den Eigenraum zum Eigenwert λ

für H_{ψ_n} bzw. H_ψ. Nach Reed-Simon I [53] folgt aus der Normresolventenkonvergenz von H_{ψ_n} gegen H_ψ, daß P_n in der Operatornorm gegen P konvergiert.
Es ist also für alle $\varphi \in \mathcal{H}$

$$|P_n\varphi - P\varphi| < \varepsilon|\varphi| \quad .$$

wenn $n \geq n_o(\varepsilon)$ ist.

Daher ist für beliebige normierte Vektoren $e_1,\ldots,e_N$:

$$\sum_{i=1}^{N} <Pe_i,e_i> \; > \; \sum_{i=1}^{N} <P_n e_i,e_i> \; - 1$$

falls nur $n \geq n_o(\frac{1}{N})$ ist.

Da P_n ein unendlichdimensionaler Projektor ist, kann man die e_i so wählen, daß

$$\sum_{i=1}^{N} <P_n e_i,e_i> \; = N \quad \text{ist.}$$

Folglich ist $\sum_{i=1}^{\infty} <Pe_i,e_i> = \infty$, P also unendlichdimensional, im Widerspruch zu $\lambda \in \sigma_{dis}(H_\psi)$. □

Anhang 1: Meßbarkeit und schwache Meßbarkeit

Eine Familie $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ von beschränkten Operatoren auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ heißt schwach meßbar, wenn $\omega \to \langle H_\omega\varphi,\psi\rangle$ für alle $\varphi,\psi \in \mathcal{H}$ eine meßbare Funktion ist.

In § 6 (Proposition 5) zeigten wir, daß aus der schwachen Meßbarkeit einer Familie beschränkter, selbstadjungierter Operatoren deren Meßbarkeit, d.h. die schwache Meßbarkeit der Resolvente folgt.

Für unbeschränkte Operatoren H_ω läßt sich die schwache Meßbarkeit nicht wie oben definieren, da $\langle H_\omega\varphi,\psi\rangle$ i.a. nicht für alle $\varphi,\psi \in \mathcal{H}$ definiert ist.

Ist eine Teilmenge V von $\mathcal{H}$ im Definitionsbereich $\mathcal{D}(H_\omega)$ von H_ω für fast alle $\omega\in\Omega$ enthalten, so nennen wir die Familie $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ auf V schwach meßbar, wenn $\omega \to \langle H_\omega\varphi,\ \psi\rangle$ für alle $\varphi,\psi \in V$ eine meßbare Funktion ist.

Wir werden in Proposition 16 zeigen, daß aus der schwachen Meßbarkeit auf Mengen V mit besonderen Eigenschaften die Meßbarkeit folgt. Dazu stellen wir zunächst einige Hilfsmittel aus der Hilbertraumtheorie zusammen.

Ist H ein symmetrischer Operator im Hilbertraum $\mathcal{H}$, so bezeichnen wir mit $C^\infty(H) = \bigcap_{n\in\mathbb{N}} \mathcal{D}(H^n)$ den Durchschnitt der Definitionsbereiche der Operatoren H^n. Ein Vektor $\varphi \in C^\infty(H)$ heißt analytischer Vektor, wenn es eine Zahl $t_o > 0$ gibt, so daß

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|H^n\varphi\|}{n!} |t|^n < \infty \qquad (1)$$

für alle t gilt mit $|t| < t_o$; $\varphi \in C^\infty(H)$ heißt ganzer Vektor, wenn (1) für alle $t\in\mathbb{R}$ gilt.

Der folgende Satz ist eine leichte Modifikation des Satzes von Nelson:

Satz: a) Ein selbstadjungierter Operator hat eine dichte Menge ganzer Vektoren.

b) Hat ein symmetrischer Operator eine dichte Menge ganzer Vektoren, so ist er wesentlich selbstadjungiert.

Der Beweis ergibt sich unmittelbar aus Satz 8.31 und dem Beweis der Folgerung 1 in Weidmann [61].

Die für unsere Zwecke wichtigste Eigenschaft ganzer Vektoren ist:

Satz: Ist der Operator H selbstadjungiert und φ ein ganzer Vektor zu H, so gilt:

$$e^{itH}\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H^n\varphi}{n!}(it)^n \qquad (2)$$

für alle $t\in\mathbb{R}$.

Beweis: Siehe Satz 8.30 in Weidmann [61].

Wir sind nun in der Lage das angekündigte Ergebnis zu formulieren und zu beweisen:

Proposition 16: Ist $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ eine Familie selbstadjungierter Operatoren auf $\mathcal{H}$ und ist G ein dichter Teilraum von $\mathcal{H}$, dessen Elemente zu fast allen H_ω, $\omega\in\Omega$, ganze Vektoren sind und ist $\{H_\omega\}$ auf G schwach meßbar, so ist die Familie $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ meßbar.

Bew.: Aus der schwachen Meßbarkeit von H_ω auf G ergibt sich analog zu Lemma 3 in § 6 die schwache Meßbarkeit von H_ω^n auf G. Aus Gleichung (2) folgt:

$$\langle e^{itH_\omega}\varphi,\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\langle H_\omega^n\varphi,\psi\rangle}{n!}(it)^n \qquad (3)$$

für $\varphi\in G$ und $\psi\in G$. Die Summanden auf der rechten Seite von (3) sind meßbar (in ω), also auch die Reihe, also die linke Seite. Da G dicht in $\mathcal{H}$ ist und e^{itH_ω} stetig ist, folgt daraus die Meßbarkeit von $\omega \to \langle e^{itH_\omega}\varphi,\psi\rangle$ für alle $\varphi,\psi\in\mathcal{H}$.

Nach Proposition 4 folgt hieraus die Meßbarkeit von $\{H_\omega\}$. □

Anhang 2: Meßbarkeit gewisser Projektionsoperatoren

In diesem Anhang wollen wir Proposition 9 aus § 7 beweisen. Dazu benötigen wir zunächst einige Hilfsmittel aus der Theorie der analytischen Mengen. Wir entnehmen das benötigte Material dem Kapitel III aus dem Buch von Meyer [41]. Für Definitionen und Beweise der zitierten Resultate verweisen wir auf dieses Werk. Ist E eine Menge mit einer Pflasterung (engl. "paving") $\mathcal{E}$, so bezeichne $\mathcal{A}(\mathcal{E})$ das System aller $\mathcal{E}$-analytischen Mengen. Ist E ein topologischer Raum, so sei $\mathcal{B}(E)$ die σ-Algebra der Borelmengen auf E. Ist $A \subset E \times F$, so sei $pr_F A = \{y \in F;\ \exists\ x \in E\ (x,y) \in A\}$. Entscheidend für den Beweis von Proposition 9 ist:

Proposition 17: Ist E ein polnischer Raum, F eine Menge und $\mathcal{F}$ eine σ-Algebra auf F, so folgt aus:

$$A \in \mathcal{A}(\mathcal{B}(E) \times \mathcal{F}),$$

daß gilt:

$$pr_F A \in \mathcal{A}(\mathcal{F}).$$

Bew.: Der Beweis besteht aus einer Kombination von Sätzen aus Meyer [41]. Zunächst reduzieren wir das Problem auf den Fall, daß E ein kompakter metrischer Raum ist.

Zu jedem polnischen Raum E findet man nach T13c) aus Kapitel III in [41] einen kompakten metrischen Raum E' und eine surjektive meßbare Abbildung $\phi: E' \to E$.

Definiert man $\psi: E' \times F \to E \times F$ durch $\psi(x,y) = (\phi(x),y)$, so ist ψ ebenfalls surjektiv und es gilt $\psi^{-1}(\mathcal{B}(E) \times \mathcal{F}) \subset \mathcal{B}(E') \times \mathcal{F}$. Aus T11 (Kapitel III in [41]) folgt, daß

$$\psi^{-1}(\mathcal{A}(\mathcal{B}(E) \times \mathcal{F})) \subset \mathcal{A}(\mathcal{B}(E) \times \mathcal{F}) \text{ ist.}$$

Folglich ist $A' = \psi^{-1}(A)$ in $\mathcal{A}(\mathcal{B}(E') \times \mathcal{F})$.

Wegen der Surjektivität von ϕ ist ferner $pr_F A' = pr_F A$. Es genügt also zu zeigen, daß die Behauptung des Satzes für kompakte metrische Räume E gilt. Ist $\mathcal{K}$ die Pflasterung der kompakten Mengen auf einem kompakten metrischen Raum E, so ist die von $\mathcal{K}$ erzeugte Sigmaalgebra $\sigma(\mathcal{K})$ die Sigmaalgebra $\mathcal{B}(E)$ der Borelmengen. Da ferner Komplemente kompakter Mengen in E Vereinigungen von kompakten Mengen (also $\mathcal{K}_\sigma$-Mengen) sind, folgt nach T12 in [41], daß $\mathcal{O}(\mathcal{K}) = \mathcal{O}(\mathcal{B}(E))$ gilt. Da $\mathcal{F}$ eine σ-Algebra ist, folgt ferner $\mathcal{O}(\mathcal{K} \times \mathcal{F}) = \mathcal{O}(\mathcal{B}(E) \times \mathcal{F})$. Ist $A \in \mathcal{O}(\mathcal{K} \times \mathcal{F})$, so folgt nach T9 in [41], daß $pr_\Omega A \in \mathcal{O}(\mathcal{F})$ liegt. Daraus folgt die Behauptung. □

Eine Anwendung dieses Satzes auf Projektoren im (separablen) Hilbertraum - darunter verstehen wir immer orthogonale Projektoren - enthält die folgende Proposition. Dazu bezeichne $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ die σ-Algebra der Borelmengen auf $\mathcal{H}$. Ist W ein abgeschlossener Unterraum von $\mathcal{H}$, so bezeichne P_W den Projektor auf W. $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ sei wie immer ein vollständiger Wahrscheinlichkeitsraum.

Proposition 18: Ist W_ω zu (fast) jedem $\omega \in \Omega$ ein abgeschlossener Unterraum von $\mathcal{H}$ und ist

$$\{(\varphi,\omega) \in \mathcal{H} \times \Omega ; \varphi \in W_\omega\}$$

eine $\mathcal{B}(\mathcal{H}) \times \mathcal{F}$-analytische Menge,

so ist die Abbildung $\omega \to P_{W_\omega}$ schwach meßbar.

Bew.: Für $\psi \in \mathcal{H}$ gilt:

$$\{\omega; \langle P_{W_\omega^\perp} \psi, \psi \rangle \leq \lambda\} = \{\omega; \langle P_{W_\omega^\perp} \psi, P_{W_\omega^\perp} \psi \rangle \leq \lambda\}$$

$$= \{\omega; \min_{\varphi \in W_\omega} \|\varphi - \psi\|^2 \leq \lambda\} = \{\omega; \exists \varphi \in V_\omega \ \|\varphi - \psi\|^2 \leq \lambda\}$$

$$= pr_\Omega\{(\varphi,\omega) \in \mathcal{H} \times \Omega ; \varphi \in W_\omega, \|\varphi - \psi\|^2 \leq \lambda\}$$

$$= pr_\Omega(\{(\varphi,\omega); \|\varphi - \psi\|^2 \leq \lambda\} \cap \{(\varphi,\omega); \varphi \in W_\omega\}).$$

Laut Voraussetzung gilt: $\{(\varphi,\omega); \varphi \in W_\omega\} \in \mathcal{O}(\mathcal{B}(E) \times \mathcal{F})$. Da auch $\{(\varphi,\omega); \|\varphi - \psi\|^2 \leq \lambda\} \in \mathcal{O}(\mathcal{B}(E) \times \mathcal{F})$ gilt, folgt aus Proposition 17, daß die

Menge $\{\omega;\langle P_{W_\omega^\perp}\psi,\psi\rangle \leq \lambda\}$ zu $\mathcal{O}(\mathcal{F})$ gehört. Da $(\Omega,\mathcal{F},P)$ vollständig ist, folgt $\mathcal{O}(\mathcal{F}) = \mathcal{F}$ (Meyer [41], Kapitel III.24). Folglich ist $P_{W_\omega^\perp}$ schwach meßbar, also auch $P_{W_\omega} = 1 - P_{W_\omega^\perp}$. □

Wir kommen nun zum Beweis von Proposition 9:

Proposition 9 (siehe § 7): Ist $\{H_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ eine meßbare Familie selbstadjungierter Operatoren auf $\mathcal{H}$, so sind die folgenden Abbildungen schwach meßbar:

(i) $\omega \to P_{pp}(\omega)$

(ii) $\omega \to P_c(\omega)$

(iii) $\omega \to P_{ac}(\omega)$

(iv) $\omega \to P_{sin}(\omega)$.

Bew.: Wegen $P_{pp}(\omega) = 1 - P_c(\omega)$ und $P_{sin}(\omega) = P_c(\omega) - P_{ac}(\omega)$ folgen (i) und (iv) aus (ii) und (iii).

Zu (ii): Wir zeigen, daß $\{(\varphi,\omega);\ \varphi\in\mathcal{H}_c^\omega\}$ eine $\mathcal{B}(\mathcal{H})\times\mathcal{F}$ -analytische Menge ist. Aus Proposition 18 folgt dann die Behauptung.

Es bezeichne - wie üblich - $E_\omega(\lambda)$ die Spektralschar zu H_ω.

Da eine beschränkte monotone stetige Funktion gleichmäßig stetig ist, gilt:

$$\{(\varphi,\omega);\ \varphi\in\mathcal{H}_c^\omega\} = \{(\varphi,\omega);\ \lambda\to\langle E_\omega(\lambda)\varphi,\varphi\rangle \text{ ist stetig}\}$$

$$= \{(\varphi,\omega);\ \lambda\to\langle E_\omega(\lambda)\varphi,\varphi\rangle \text{ ist gleichmäßig stetig}\}$$

$$= \{(\varphi,\omega);\ \forall_{m\in\mathbb{N}}\ \exists_{n\in\mathbb{N}}\ \forall_{\lambda,\lambda'\in\mathbb{R}}\ |\lambda-\lambda'|<\tfrac{1}{n} \Rightarrow |\langle(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\lambda'))\varphi,\varphi\rangle|<\tfrac{1}{m}\}$$

$$= \{(\varphi,\omega);\ \forall_{m\in\mathbb{N}}\ \exists_{n\in\mathbb{N}}\ \forall_{\lambda,\lambda'\in Q}\ |\lambda-\lambda'|<\tfrac{1}{n} \Rightarrow |\langle(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\lambda'))\varphi,\varphi\rangle|<\tfrac{1}{m}\}$$

(da $E_\omega(\lambda)$ rechtsseitig stetig ist.)

$$= \bigcap_{m\in\mathbb{N}}\bigcup_{n\in\mathbb{N}}\bigcap_{\substack{\lambda,\lambda'\in Q\\ |\lambda-\lambda'|<\frac{1}{n}}} \{(\varphi,\omega);\ |\langle(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\lambda'))\varphi,\varphi\rangle|<\tfrac{1}{m}$$

Da $\{H_\omega\}$ meßbar ist, folgt, daß die Funktion

$$\omega \to f(\varphi,\omega) = \langle(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\lambda'))\varphi,\varphi\rangle$$

für festes $\varphi\in\mathcal{H}$ und festes λ,λ' meßbar ist, ferner ist f in φ stetig.

Folglich ist f in (ω,φ) (simultan) meßbar. Die Menge

$\{(\varphi,\omega);\ |<(E_\omega(\lambda)-E_\omega(\lambda'))\varphi,\varphi>| < \frac{1}{m}\}$ ist also $\mathcal{B}(\mathcal{H})\times\mathcal{F}$ -meßbar, folglich auch $\{(\varphi,\omega);\ \varphi\in\mathcal{H}^\omega_c\}$. Mit Hilfe von Proposition 18 folgt daher die schwache Meßbarkeit von $\omega\to P_c(\omega)$.

Ähnlich verläuft der Beweis von (iii):

$$\{(\varphi,\omega);\ \varphi\in\mathcal{H}^\omega_{ac}\} = \{(\varphi,\omega);\ \exists g\in L^1(\mathbb{R})\ \forall\ \lambda\in Q\ <E_\omega(\lambda)\varphi,\varphi> = \int_{-\infty}^{\lambda} g(t)dt\}$$

$$= \mathrm{pr}_{\mathcal{H}\times\Omega}\ \{(g,\varphi,\omega)\in L^1(\mathbb{R})\times\mathcal{H}\times\Omega;\ \forall\ \lambda\in Q\ \ <E_\omega(\lambda)\varphi,\varphi> = \int_{-\infty}^{\lambda} g(t)dt\}$$

(Daß die Gleichung für alle $\lambda\in Q$ erfüllt ist, genügt wegen der Rechtsstetigkeit der Spektralschar.)

Es gilt:

$$\{(g,\varphi,\omega);\ \forall\ \lambda\in Q\ \ <E_\omega(\lambda)\varphi,\varphi> = \int_{-\infty}^{\lambda} g(t)dt\}$$

$$= \bigcap_{\lambda\in Q}\{(g,\varphi,\omega);\ <E_\omega(\lambda)\varphi,\varphi> = \int_{-\infty}^{\lambda} g(t)dt\}.$$

Die Funktion $f(\omega,\varphi,g) = <E_\omega(\lambda)\varphi,\varphi> - \int_{-\infty}^{\lambda} g(t)dt$ ist meßbar in ω und stetig in φ und g.

Also ist die Menge

$$\{(g,\varphi,\omega);\ f(\omega,\varphi,g) = 0\} = \{(g,\varphi,\omega);\ <E_\omega(\lambda)\varphi,\varphi> = \int_{-\infty}^{\lambda} g(t)dt\}$$

$\mathcal{B}(L^1(\mathbb{R}))\times\mathcal{B}(\mathcal{H})\times\mathcal{F}$ -meßbar, also insbesondere analytisch.

Nach Proposition 17 ist daher $\{(\varphi,\omega);\ \varphi\in\mathcal{H}^\omega_{ac}\}$ eine $\mathcal{B}(\mathcal{H})\times\mathcal{F}$ -analytische Menge. Nach Proposition 18 ist demnach $P_{ac}(\omega)$ schwach meßbar. □

Kapitel III: Das Spektrum gewisser stochastischer Operatoren

§ 13. Zulässige Potentiale I (Operatorsummen)

In diesem Kapitel kehren wir wieder zu Schrödingeroperatoren H_ω der Gestalt:

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-x_i) \qquad (1)$$

zurück, wobei die $f_i(\omega)$ Funktionen oder quadratische Formen sein können. Wir werden zeigen, daß sich das Spektrum solcher Operatoren aus den Spektren gewisser periodischer, nicht stochastischer Operatoren berechnen läßt. Dies geschieht in diesem Abschnitt für Operatoren H_ω, die als Operatorsummen definiert sind (siehe § 2 und § 3), im nächsten Abschnitt (§ 14) für Formsummen.

Daraus lassen sich zunächst einige Aussagen über das Spektrum von H_ω herleiten (Bänderstruktur, Abwesenheit von Eigenwerten), in den folgenden Abschnitten Kriterien für die Existenz von Energielücken herleiten (§ 15).

Für diesen Abschnitt (§ 13) machen wir über die Potentiale $V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-$ die folgenden Annahmen:

V1) $\{f_i\}_{i \in Z^d}$ ist ein meßbares, ergodisches stochastisches Feld mit Werten in $L^p(1^1)$ ($p=2$ für $d \leq 3$, $p > 2$ für $d = 4$, $p \geq \frac{d}{2}$ für $d \geq 5$).

V2) Bezeichnet $\mathcal{F}_I$ die von f_i, $i \in I \subset Z^d$ erzeugte σ-Algebra, so soll gelten: Ist $I \cap J = \emptyset$, $A \in \mathcal{F}_I$, $B \in \mathcal{F}_J$ und gilt $P(A) > 0$, $P(B) > 0$, so folgt $P(A \cap B) > 0$.

V3) $\overline{V}_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} |f_i(\omega, x-x_i)|$ ist fast sicher lokal quadratintegrierbar.

V4) $H_\omega = -\Delta + V_\omega$ ist fast sicher wesentlich selbstadjungiert auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Die Bedingungen V1) und V4) wurden bereits ausführlich diskutiert (vgl. §§ 2,3,5). Dort wurde auch implizit jeweils V3) nachgewiesen. Neu ist die Bedingung V2). Zur Erläuterung ihrer physikalischen Bedeutung kommen wir nochmals auf Überlegungen in § 5 zurück. Dort hatten wir uns vorgestellt, daß der Festkörper durch einen zufälligen Prozeß z.B. durch Abkühlen aus einer Schmelze entstehe. Dabei hatten wir angenommen, daß ein bereits in x_i befindliches Teilchen die Besetzung des Gitterplatzes x_j beeinflußt, jedoch diese Beeinflussung mit wachsendem Abstand gegen Null geht. Bedingung 2) besagt nun, daß bereits in x_j, $j \in J$ befindliche Teilchen die Besetzung des Gitterplatzes x_i durch eine bestimmte Teilchenart zwar sehr unwahrscheinlich machen können, jedoch nicht völlig verhindern können. Für die weiteren Untersuchungen dieses Kapitels wird sich die folgende Begriffsbildung als nützlich erweisen: Wir nennen eine Funktion $W = \sum_{i \in Z^d} \varphi_i(x-x_i)$ ein (bezüglich $H_\omega = -\Delta + \Sigma f_i(\omega, x-x_i)$) zulässiges Potential, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

Z1) $\varphi_i \in \text{supp } P_{f_o}$

Z2) $\overline{W}(x) = \Sigma|\varphi_i(x-x_i)|$ ist lokal quadratintegrierbar.

Z3) $H_\omega = -\Delta + W$ ist wesentlich selbstadjungiert auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Mit $\mathfrak{Z}$ bezeichnen wir die Klasse aller (bezüglich H_ω) zulässigen Potentiale. Wegen V3) und V4) ist $V_\omega(x) = \Sigma f_i(\omega, x-x_i)$ fast sicher ein zulässiges Potential. Ferner ist für jedes $\varphi \in \text{supp } P_{f_o}$ die Funktion $W = \Sigma\varphi(x-x_i)$ ein zulässiges Potential (Z3) wurde in Proposition 1 gezeigt.) Allgemeiner: Sind $\varphi_i \in \text{supp } P_{f_o}$ und gilt:

$$\varphi_{i+a_j} = \varphi_i \quad \text{für } a_1, \ldots, a_d \in Z^d \text{ linear unabhängige Vektoren in } \mathbb{R}^d \tag{2}$$

so erfüllt $W = \Sigma\varphi_i(x-x_i)$ die Bedingungen Z2) und Z3), ist also ein zulässiges

Potential. Zulässige Potentiale, die (2) erfüllen, nennen wir periodische zulässige Potentiale. Die Klasse der periodischen zulässigen Potentiale bezeichnen wir mit $\mathcal{P}$.

Wir wissen bereits aus Kapitel 2, daß das Spektrum $\sigma(H_\omega)$ für fast alle ω die gleiche Menge Σ ist. Für eine gegebene Realisierung ω_o ist es jedoch nicht einfach zu entscheiden, ob $\sigma(H_{\omega_o}) = \Sigma$ ist oder ob ω_o in der Ausnahmemenge liegt. Viele physikalisch interessante Realisierungen wie z.B. $V_{\omega_o} = \Sigma\varphi(x-x_i)$, φ fest, sind in praktisch allen Fällen sogar sicher in der Ausnahmemenge $= \{\omega;\sigma(H_\omega) \neq \Sigma\}$. In der Tat sind Potentiale W der Gestalt $W = \Sigma\varphi(x-x_i)$ physikalisch interessant, da sie die reinen Kristalle repräsentieren, während $V_\omega = \Sigma\varphi_i(\omega,x-x_i)$ die aus den "reinen" Komponenten in zufälliger Weise gemischten Kristalle darstellen.

Der folgende Satz gibt über solche Potentiale eine Auskunft. Es besagt, daß für alle zulässigen Potentiale W das Spektrum $\sigma(-\Delta+W)$ jedenfalls in Σ enthalten ist.

Der Vorteil von Satz 11 gegenüber z.B. Satz 6 ist, daß die Bedingungen Z1) - Z3) wesentlich einfacher nachzuprüfen sind als die Zugehörigkeit von ω zu $\Omega_1 = \{\omega;\sigma(H_\omega) = \Sigma\}$.

Satz 11: Ist W ein (bezüglich H_ω) zulässiges Potential, so ist das Spektrum $\sigma(H_W)$ des Operators $H_W = -\Delta + W$ eine Teilmenge von Σ.

Bew.: Wir setzen $\Omega_1 = \{\omega\in\Omega;\ \sigma(H_\omega) = \Sigma\}$; $B_N = \{x;|x| \leq N\}$ und

$$A = \{\omega\in\Omega;\ \forall_{k\in\mathbb{N}}\ \forall_{N\in\mathbb{N}}\ \exists_{x_o(N,k,\omega)\in Z^d}$$

$$\left(\int_{B_N} |W(x)-V_\omega(x+x_o(N,k,\omega))|^2 dx\right)^{1/2} < \frac{1}{k}\}\ .$$

Wir wissen bereits aus Kapitel II, daß $P(\Omega_1) = 1$ ist.

In Lemma 4 werden wir zeigen, daß $P(A) = 1$ ist, also ist insbesondere $P(A \cap \Omega_o) = 1$.

Ist nun $\lambda \in \sigma(H_W)$, so gibt es nach dem Weyl-Kriterium (vgl. z.B. Weidmann [61] Satz 7.22) eine Folge $\{\varphi_k\}_{k\in\mathbb{N}} \subset C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$, so daß $\|\varphi_k\|_2 = 1$ und $\|H_W\varphi_k - \lambda\varphi_k\|_2 < \frac{1}{2k}$.

Wir wählen nun $\omega \in A \cap \Omega_o$ und zu $k\in\mathbb{N}$ ein N_k so groß, daß $\operatorname{supp} \varphi_k \subset B_{N_k}$ ist.

Dann gibt es nach der Definition von A ein $x_o = x_o(k)$ so, daß

$$\left(\int_{B_{N_k}} |W(x)-V_\omega(x+x_o)|^2 dx\right)^{1/2} < \frac{1}{2k\|\varphi_k\|_\infty}$$

Wir definieren $\psi_k(x) = \varphi_k(x-x_o(k))$.

Offensichtlich ist $\psi_k \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$, $\|\psi_k\|_2 = 1$ und $\|\psi_k\|_\infty = \|\varphi_k\|_\infty$.

Es gilt:

$$\|H_\omega\psi_k - \lambda\psi_k\|_2 = \|(-\Delta + V_\omega(x+x_o(k))\varphi_k - \lambda\varphi_k\|_2$$

$$\leq \|H_W\varphi_k - \lambda\varphi_k\|_2 + \|(W(x)-V_\omega(x+x_o(k)))\varphi_k\|_2$$

$$\leq \frac{1}{2k} + \left(\int_{B_{N_k}} |W(x)-V_\omega(x+x_o)|^2 dx\right)^{1/2} \|\varphi_k\|_\infty$$

$$\leq \frac{1}{k}$$

Also ist λ nach dem Weylkriterium in $\sigma(H_\omega)$, $\lambda \in \sigma(H_\omega) = \Sigma$, also $\sigma(H_W) \subset \Sigma$. □

Bevor wir uns dem im Beweis benötigten Lemma zuwenden, erwähnen wir noch folgendes Korollar:

Korollar: $\Sigma = \bigcup_{W\in\mathcal{Z}} \sigma(H_W)$.

Bew.: Wegen Satz 11 gilt $\bigcup_{W \in \mathcal{Z}} \sigma(H_W) \subset \Sigma$.
Andererseits ist V_ω für fast alle ω ein zulässiges Potential, also
$P(\{\omega;\sigma(H_\omega) = \Sigma\} \cap \{\omega; V_\omega$ ist ein zulässiges Potential$\}) = 1$. Daraus folgt
$\Sigma \subset \bigcup_{W \in \mathcal{Z}} \sigma(H_\omega)$. □

Aus dem Korollar folgt die vielleicht überraschende Aussage, daß das Spektrum von H_ω nur von supp P_{f_o} abhängt, aber nicht von weiteren Eigenschaften von P_{f_o}. Dies bedeutet physikalisch, daß das "Mischungsverhältnis" der Komponenten keinen Einfluß auf das Spektrum der "zufälligen Mischung" hat. Das Befremden hierüber wird jedoch dadurch gemildert, daß die "Besetzungsdichten" der Energiezustände sehr wohl von P_{f_o} und nicht nur vom Träger des Maßes abhängen. Der "Besetzungsdichte" der Zustände entspricht mathematisch die sogenannte Zustandsdichte (engl. "density of states") (vgl. Reed-Simon IV [53], Pastur [50] u.a.). Auf diesen interessanten Aspekt wollen wir hier nicht weiter eingehen. Für die Untersuchung der Zustandsdichte bei den hier betrachteten Potentialen verweisen wir auf Kirsch und Martinelli [32b].
Es bleibt also noch, das folgende Lemma zu zeigen:

Lemma +: Ist W ein zulässiges Potential, so hat die Menge

$$A = \{\omega \in \Omega; \forall_{k \in \mathbb{N}} \forall_{N \in \mathbb{N}} \exists_{x_c = x_o(k,N,\omega) \in Z^d} \left(\int_{B_N} |W(x)-V(x+x_o)|^2 dx\right)^{1/2} < \frac{1}{k}\}$$

Wahrscheinlichkeit Eins.

Bew.: Setzen wir

$$A_{k,N} = \{\omega \in \Omega; \exists_{x_o \in Z^d} \left(\int_{B_N} |W(x)-V_\omega(x+x_o)|^2 dx\right)^{1/2} < \frac{1}{k}\}.$$

Offensichtlich ist $A = \bigcap_{k,N \in \mathbb{N}} A_{k,N}$.

Um $P(A) = 1$ zu zeigen, genügt es also, $P(A_{k,N}) = 1$ für alle k,N zu zeigen.

Die Mengen $A_{k,N}$ sind invariant unter den ergodischen Transformationen $\{T_i\}_{i \in Z^d}$, also folgt $P(A_{k,N}) = 0$ oder $P(A_{k,N}) = 1$.

Wir zeigen, daß es eine Teilmenge $C_{k,N}$ von $A_{k,N}$ von strikt positiver Wahrscheinlichkeit gibt. Daraus folgt dann $P(A_{k,N}) = 1$ und $P(A) = 1$.

Wir definieren:

$$C_{k,N} = \{\omega \in \Omega;\ (\int_{B_N} |W(x)-V_\omega(x)|^2 dx)^{1/2} < \frac{1}{k}\} .$$

Wir zeigen, daß $C_{k,N}$ positive Wahrscheinlichkeit hat, indem wir f_i für kleine $|i|$ in der Nähe von φ_i wählen, während für große $|i|$ die Integrale

$$(\int_{B_N} |\sum_{|i|>M} |f_i(\omega,x-x_i)||^2 dx|^{1/2} \text{ und } (\int_{B_N} |\sum_{|i|>M} |\varphi_i(x-x_i)||^2 dx)^{1/2}$$

klein werden sollten.

Genauer:

Nach V3) ist $\overline{V}_\omega = \sum_{i \in Z^d} |f_i(\omega,x-x_i)|$ fast sicher lokal quadratintegrierbar.
Also hat das Ereignis

$$D = \{\omega;\ \exists_{M \in \mathbb{N}}\ (\int_{B_N} |\sum_{|i|>M} |f_i(\omega,x-x_i)||^2 dx)^{1/2} < \frac{1}{3k}\}$$

Wahrscheinlichkeit Eins.

Setzen wir

$$D_M := \{\omega;\ (\int_{B_N} |\sum_{|i|>M} |f_i(\omega,x-x_i)||^2 dx)^{1/2} < \frac{1}{3k}\}$$

so gilt $D_M \subset D_{M+1}$ und $\bigcup_{M \in \mathbb{N}} D_M = D$,

also gibt es ein M_1, so daß $P(D_M) > 0$, wenn $M \geq M_1$ ist. Wir wählen nun $M \geq M_1$ und ferner so groß, daß

$$\left(\int_{B_N} \Big| \sum_{|i|>M} |\varphi_i(x-x_i)| \Big|^2 dx\right)^{1/2} < \frac{1}{3k}$$

gilt, was wegen Z2) möglich ist.

Wir definieren ferner:

$$G_i = \{\omega;\ \|f_i(\omega)-\varphi_i\|_{L^p(l^1)} < \frac{1}{3k(2M+1)^d}\}$$

und $G = \bigcap_{|i|\leq M} G_i$.

Da $\varphi_i \in \operatorname{supp} P_{f_i}$ liegt, hat jedes G_i positive Wahrscheinlichkeit. Die Mengen G_i gehören zur σ-Algebra $\mathcal{F}_{\{i\}}$ (in der Notation von V2)). Wiederholtes Anwenden von V2) zeigt daher, daß G positive Wahrscheinlichkeit hat.

Die Menge D_M hat ebenfalls positive Wahrscheinlichkeit und gehört zu $\mathcal{F}_{\{|i|>M\}}$. Da $G \in \mathcal{F}_{\{|i|\leq M\}}$ gilt, folgt, daß $P(G \cap D_M) > 0$ ist.
Das Lemma ist nun bewiesen, wenn wir zeigen können, daß $G \cap D_M$ eine Teilmenge von $C_{K,N}$ ist.

Dazu merken wir zunächst an, daß

$$\left(\int_{B_N} |\psi|^2 dx\right)^{1/2} \leq \|\psi\|_{L^p(l^1)} \qquad (*)$$

ist für $p \geq 2$.

Ist nun $\omega \in G \cap D_M$, so gilt:

$$\left(\int_{B_N} |W(x)-V_\omega(x)|^2 dx\right)^{1/2}$$

$$= \left(\int_{B_N} \Big| \sum_{i\in Z^d} \varphi_i(x-x_i) - \sum_{i\in Z^d} f_i(\omega,x-x_i)\Big|^2 dx\right)^{1/2}$$

$$\leq \left(\int_{B_N} \Big| \sum_{|i|>M} \varphi_i(x-x_i)\Big|^2 dx\right)^{1/2} + \left(\int_{B_N} \Big| \sum_{|i|>M} f_i(\omega,x-x_i)\Big|^2 dx\right)^{1/2}$$

$$+ \sum_{|i|\leq M} \left(\int_{B_N} |\varphi_i(x_i)-f_i(\omega,x-x_i)|^2 dx\right)^{1/2}$$

$$< \frac{1}{3k} + \frac{1}{3k} + \sum_{|i|\leq M} \|f_i(\omega)-\varphi_i\|_{L^p(l^1)} < \frac{1}{k}$$

wobei wir die Abschätzung (*) ausgenützt haben sowie die Annahme $\omega \in G \cap D_M$. Folglich gilt $G \cap D_M \subset C_{k,N}$ und das Lemma ist bewiesen. □

Satz 11 und das zugehörige Korollar sind natürlich von geringem Nutzen für die Berechnung von Σ, da die Klasse $\mathcal{J}$ unüberschaubar groß ist und die Berechnung von $\sigma(H_W)$ für $W \in \mathcal{J}$ im allgemeinen außerordentlich schwierig ist. Der folgende Satz 12 vereinfacht jedoch die Untersuchung von Σ erheblich:

Satz 12: Unter den allgemeinen Voraussetzungen dieses Kapitels (nämlich V1) - V4)) gilt:

$$\Sigma = \overline{\bigcup_{W \in \mathcal{P}} \sigma(H_W)} \tag{3}$$

wobei $\mathcal{P}$ die Klasse aller periodischen zulässigen Potentiale bezeichnet.

Bew.: Wir zeigen, daß für jedes zulässige Potential U gilt

$$\sigma(H_U) \subset \overline{\bigcup_{W \in \mathcal{P}} \sigma(H_W)}$$

daraus folgt dann

$$\Sigma = \bigcup_{U \in \mathcal{J}} \sigma(H_U) \subset \overline{\bigcup_{W \in \mathcal{P}} \sigma(H_W)} \subset \overline{\bigcup_{U \in \mathcal{J}} \sigma(H_U)} = \overline{\Sigma} = \Sigma$$

also

$$\Sigma = \overline{\bigcup_{W \in \mathcal{P}} \sigma(H_W)}.$$

Ist also U ein beliebiges zulässiges Potential, so konstruieren wir periodische zulässige Potentiale U_n so, daß $H_{U_n} \to H_U$ im Sinne der starken Resolventenkonvergenz,

daraus folgt dann nämlich, daß

$$\sigma(H_U) \subset \{\lambda;\ \lambda = \lim \lambda_n,\ \lambda_n \in \sigma(U_n)\} \subset \overline{\bigcup_{W \in \mathcal{P}} \sigma(H_W)}$$

(vgl. Reed-Simon I Ch. VIII.7).

Wir konstruieren nun einige Funktionen, mit deren Hilfe wir die zulässigen Potentiale U_n definieren werden.

Zu $n\in\mathbb{N}$ bezeichne $K_n = \bigcup_{|i|\le n} C_i = \bigcup_{|i|\le n} C_o+x_i$.

K_n ist eine aufsteigende Folge beschränkter Mengen und $\bigcup_{n\in\mathbb{N}} K_n = \mathbb{R}^d$.

Wir wählen eine beliebige Funktion $\psi\in \operatorname{supp} P_{f_o}$. Insbesondere ist $\psi\in L^p(l^1)$. Wegen $p\ge 2$ folgt daraus $\psi\in L^2(l^1)$. Folglich gibt es zu jedem $n\in\mathbb{N}$ eine Zahl $M_n \ge 0$, so daß

$$\left(\int_{K_n} \Big| \sum_{|i|>M_n} |\psi(x-x_i)| \Big|^2 dx\right)^{1/2} < \frac{1}{4N} \tag{4}$$

ist.

Nun sei $U(x) = \sum_{i\in Z^d} \varphi_i(x-x_i)$ ein zulässiges Potential.

Aus Z2) folgt dann, daß es zu $n\in\mathbb{N}$ eine Zahl $L_n \ge 0$ gibt, so daß

$$\left(\int_{K_n} \Big| \sum_{|i|>L_n} |\varphi_i(x-x_i)| \Big|^2 dx\right)^{1/2} < \frac{1}{2N} \tag{5}$$

ist, wir können L_n so wählen, daß $L_n \ge M_n$ ist.

Wir definieren:

$$\tilde{\varphi}_i^{(n)} = \varphi_i \quad \text{für } |i| \le L_n$$

und setzen die Funktionenfolge $\tilde{\varphi}_i$ periodisch auf Z^d fest, genauer

$$\tilde{\varphi}^{(n)}_{i+(L_n+1)j} = \tilde{\varphi}_i^{(n)} \quad \text{für } |i| \le L_n \text{ und } j\in Z^d.$$

Da die $\tilde{\varphi}_i$ in $L^2(l^1)$ liegen, gibt es eine Zahl $\tilde{L}_n$, so daß

$$\left(\int_{K_n} \Big| \sum_{|i|>\tilde{L}_n} |\tilde{\varphi}_i^{(n)}(x-x_i)| \Big|^2 dx\right)^{1/2} < \frac{1}{4N} \tag{6}$$

ist; wir können $\tilde{L}_n \ge L_n$ wählen.

Wir setzen:

$$\varphi_i^{(n)} = \tilde{\varphi}_i^{(n)} = \tilde{\varphi}_i \quad \text{für } |i| \leq L_n$$

$$\varphi_i^{(n)} = \psi \qquad \text{für } L_n < |i| \leq \tilde{L}_n \quad (\psi \text{ wie in (4) gewählt})$$

und setzen $\varphi_i^{(n)}$ periodisch fort, also

$$\varphi^{(n)}_{i+(\tilde{L}_n+1)j} = \varphi_i^{(n)} \text{ für } |i| \leq \tilde{L}_n \text{ und } j \in Z^d.$$

Dann gilt:

$$\left(\int_{K_n} \Big| \sum_{|i|>L_n} |\varphi_i^{(n)}(x-x_i)| \Big|^2 dx\right)^{1/2}$$

$$\leq \left(\int_{K_n} \Big| \sum_{|i|>\tilde{L}_n} |\tilde{\varphi}_i^{(n)}(x-x_i)| \Big|^2 dx\right)^{1/2} + \left(\int_{K_n} \Big| \sum_{|i|>L_n} |\psi(x-x_i)| \Big|^2 dx\right)^{1/2}$$

$$\leq \frac{1}{4N} + \frac{1}{4N} = \frac{1}{2N} \quad \text{(wegen (6) und (4))} \tag{7}$$

Wir definieren nun

$$U_n(x) := \sum_{i \in Z^d} \varphi_i(x-x_i) \quad . \tag{8}$$

Da die Folge $\{\varphi_i\}_{i \in Z^d}$ periodisch ist, ist $U_n(x)$ offenbar periodisch. Aus der Periodizität und aus $\varphi_i \in L^p(l^1)$ für alle $i \in Z^d$ folgt, daß U_n lokal gleichmäßig p-fach integrierbar ist. Daraus folgt, daß $H_{U_n} = -\Delta + U_n$ auf $C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ wesentlich selbstadjungiert ist (siehe Reed-Simon IV [53] Theorem XIII.96), also Z3), sowie, daß $\sum_{i \in Z^d} |\varphi_i(x-x_i)|$ lokal quadratintegrierbar ist, also Z2). Da ferner - laut Konstruktion - $\varphi_i \in \text{supp } P_{f_o}$ gilt, ist U_n ein periodisches zulässiges Potential. Wir zeigen nun, daß $H_{U_n} = -\Delta + U_n$ im Sinne der starken Resolventenkonvergenz gegen $H_U = -\Delta + U$ strebt. Dazu genügt es, zu zeigen, daß für jede Funktion $f \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ gilt:

$$\| H_U f - H_{U_n} f \|_2 \to 0 \text{ für } n \to \infty \ .$$

Ist $f \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$, so ist supp $f \subset K_n$ für $n \geq n_o(f)$, also gilt für $n \geq n_o(f)$:

$$\|H_U f - H_{U_n} f\|_2 = \left(\int_{\mathbb{R}^d} |U(x)-U_n(x)|^2 \, |f(x)|^2 dx\right)^{1/2}$$

$$\leq \left(\int_{K_n} \Big| \sum_{i \in Z^d} \varphi_i(x-x_i) - \sum_{i \in Z^d} \varphi_i^{(n)}(x-x_i)\Big|^2 dx\right)^{1/2} \|f\|_\infty$$

$$\leq \|f\|_\infty \left\{ \left(\int_{K_n} \Big| \sum_{|i|>L_n} |\varphi_i(x-x_i)| \Big|^2 dx\right)^{1/2} + \left(\int_{K_n} \Big| \sum_{|i|>L_n} |\varphi_i^{(n)}(x-x_i)| \Big|^2 dx\right)^{1/}\right.$$

$$< \|f\|_\infty \left(\frac{1}{2n} + \frac{1}{2n}\right) = \frac{1}{n} \|f\|_\infty \qquad \text{(nach (5) und (7))}$$

Also konvergiert $\|H_U f - H_{U_n} f\|_2$ für festes $f \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ gegen Null.
Damit ist der Satz bewiesen. □

Wir ziehen einige erste Schlüsse aus Satz 12.

Korollar 1: Ist die Raumdimension $d \leq 3$, so hat der stochastische Operator

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-x_i)$$

unter den Voraussetzungen V1) - V4) fast sicher keine isolierten Eigenwerte.

Bem.: Das Korollar folgt für $d = 1$ aus Satz 8.
Für $d = 2$ und $d = 3$ verschärft es Satz 8 durch den Ausschluß von Eigenwerten unendlicher Vielfachheit.

Bew.: Ist λ ein isolierter Eigenwert von H_ω (fast sicher), so gibt es nach Satz 12 ein periodisches zulässiges Potential W, so daß λ ein isolierter Eigenwert von $H_W = -\Delta + W$ ist. W ist lokal quadratintegrierbar und periodisch. Daher hat H_W absolut stetiges Spektrum (Thomas [60], Reed-Simon IV [53], Theorem XIII.100), also insbesondere keine Eigenwerte, im Widerspruch zur Annahme. □

Ist V eine lokalintegrierbare periodische Funktion mit Basiszelle Q, so definieren wir für $m \in Z^d$:

$$\tilde{V}(m) = \frac{1}{|Q|} \int_Q e^{ix \cdot m} V(x)dx$$

zu $\varphi \in L^1$ sei $V_\varphi = \sum_{i \in Z^d} \varphi(x-x_i)$.

Mit l^β bezeichnen wir die Menge:

$$l^\beta = \{\varphi \in L^1; \sum_{m \in Z^d} |\tilde{V}_\varphi(m)|^\beta < \infty\} \quad .$$

Korollar 2: Ist $d > 3$ und gilt $\operatorname{supp} P_{f_o} \subset l^\beta$ mit $\beta < \frac{d-1}{d-2}$, so hat

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-x_i)$$

unter den Voraussetzungen V1) - V4) fast sicher keine isolierten Eigenwerte.

Bew.: Wie der Beweis von Korollar 1 mit Hilfe von Reed-Simon IV [53] XIII.100. □

Korollar 3: Unter den Voraussetzungen von Korollar 1 oder Korollar 2 hat Σ die Gestalt:

$$\Sigma = \overline{\bigcup_{i=0}^{\infty} [a_i, b_i]}$$

mit $a_i, b_i \in \mathbb{R}$ $a_i < b_i$.

Bew.: Ist W ein periodisches zulässiges Potential, so ist $\sigma(H_W) = \bigcup_{i=0}^{\infty} [\alpha_i(W), \beta_i(W)]$ mit $\alpha_i(W) < \beta_i(W)$ (Reed-Simon IV [53] XIII.100), also ist nach Satz 12:

$$\Sigma = \overline{\bigcup_{i \in \mathbb{N}, W \in \mathcal{P}} [\alpha_i(W), \beta_i(W)]}$$

$$= \overline{\bigcup_{i \in \mathbb{N}, W \in \mathcal{P}}]\alpha_i(W), \beta_i(W)[} \qquad (9)$$

Die Menge

$$\Sigma^o = \bigcup_{i \in \mathbb{N}, W \in \mathcal{P}}]\alpha_i(W), \beta_i(W)[$$

ist offen und wird von den offenen Intervallen $]\alpha_i(W), \beta_i(W)[$ überdeckt.

Dann wird Σ^o schon von einer abzählbaren Teilüberdeckung von $\{]\alpha_i(W),\beta_i(W)[\,;\ i\in\mathbb{N},\ W\in\mathfrak{P}\}$ überdeckt. Die Elemente dieser Teilüberdeckung nennen wir $\{]a_i,b_i[\,,\ i\in\mathbb{N}\}$ und wir können $a_i < b_i$ annehmen.
Es ist also $\Sigma^o = \bigcup]a_i,b_i[$, also

$$\Sigma = \overline{\bigcup_{i=0}^{\infty}]a_i,b_i[} \quad . \square$$

Korollar 4: Unter den Voraussetzungen von Korollar 1 oder Korollar 2 ist Σ der Abschluß einer offenen Menge.

Bew.: Folgt unmittelbar aus (9). $\square$

Dies gilt im Unterschied zu fastperiodischen Potentialen, deren Spektren typischer Weise nirgends dichte Mengen sind (Avron und Simon [7]).

§ 14. Zulässige Potentiale II (Formsummen)

In diesem Abschnitt übertragen wir Satz 11 und Satz 12 aus § 13 auf den Fall stochastischer Operatoren H_ω, die als Formsummen definiert sind, nämlich:

$$H_\omega = -\Delta + \sum_{i\in Z^d} \beta_i(\omega) x_i \qquad (1)$$

In § 4 hatten wir bereits Bedingungen für die Wohldefiniertheit und Selbstadjungiertheit von Operatoren der Gestalt (1) angegeben. Um den Begriff des zulässigen Potentials auf Formen übertragen zu können, müssen wir dem Begriff "Träger des Wahrscheinlichkeitsmaßes P_{β_i}" einen Sinn geben, d.h. wir müssen für gewisse quadratische Formen eine geeignete Topologie einführen.

Es bezeichne B die Menge aller lokalen relativ zu $H_o = -\Delta$ beschränkten symmetrischen quadratischen Formen auf der Formdomäne $\mathcal{H}_{+1}$ von $H_o = -\Delta$. Wir versehen $\mathcal{H}_{+1}$ wie üblich mit der Norm $\|\varphi\|_{+1} := \|(H_o+1)^{1/2}\varphi\|_{L^2}$. B_∞ bezeichne die Menge aller bezüglich H_o summierbar beschränkten Formen in B (siehe § 4). Ist $\beta\in B$, so gibt es eine Konstante C, so daß $|\beta(\varphi,\psi)| \le C\|\varphi\|_{+1}\|\psi\|_{+1}$ für alle $\varphi,\psi \in \mathcal{H}_{+1}$ gilt. Das Infimum aller solcher Konstanten bezeichnen wir mit $\|\beta\|$. B versehen mit der Norm $\|\cdot\|$ ist in natürlicher Weise ein Banachraum. Es gilt
$\|\beta\| = \sup\{|\beta(\varphi,\psi)|;\ \varphi,\psi \in \mathcal{H}_{+1},\ \|\varphi\|_{+1} = \|\psi\|_{+1} = 1\}$. Wir definieren:
$\|\beta\|_i := \sup\{|\beta(\varphi,\psi)|;\ \varphi,\psi \in \mathcal{H}_{+1},\ \|\varphi\|_{+1} = \|\psi\|_{+1} = 1, \operatorname{supp}\varphi\subset\tilde{C}_i,\ \operatorname{supp}\psi\subset\tilde{C}_i\}$,
wobei $\tilde{C}_i = \bigcup_{|j-i|\le 1} C_i$ ist. Für $\beta\in B_\infty$ ist $\|\beta\|_\infty := \sum_{i\in Z^d}\|\beta\|_i < \infty$. B_∞ versehen mit $\|\cdot\|_\infty$ ist ein Banachraum. Es gibt eine vom Gitter $\{x_i\}_{i\in Z^d}$ abhängige Konstante C, so daß $\|\beta\|_\infty \le C\|\beta\|$ für alle $\beta\in B_\infty$ gilt.

Wir sind nun in der Lage, Begriffe und Sätze aus § 13 auf Operatoren des Typs (1) zu übertragen.

Dazu machen wir folgende Voraussetzungen über die H_ω:

F1) $\{\beta_i\}_{i\in Z^d}$ ist ein meßbares, ergodisches stochastisches Feld mit Werten in B_∞.

F2) Die endlichdimensionalen Verteilungen $P_{\beta_{i_1},—,\beta_{i_n}}$ der Zufallsvariablen $\beta_{i_1},—,\beta_{i_n}$ haben die folgende Eigenschaft:

$$\text{supp } P_{\beta_{i_1},—,\beta_{i_n}} = \text{supp } P_{\beta_{i_1}} \times \text{supp } P_{\beta_{i_2}} \times \ldots \times \text{supp } P_{\beta_{i_n}}$$

$$= \bigtimes_{i=1}^{n} \text{supp } P_{\beta_o} .$$

Der Träger supp ist im Sinne der Topologie von B_∞ zu verstehen.

F3) Die Formen $\beta \in \text{supp } P_{\beta_o}$ sind gleichmäßig summierbar beschränkt relativ zu H_o (siehe § 4).

F4) Die quadratischen Formen $\zeta(\omega) \doteq \sum_{i\in Z^d} \beta_i(\omega)_{x_i}$ sind für alle $\beta_i \in \text{supp } P_{\beta_o}$ formbeschränkt relativ zu H_o mit den selben Schranken $a < 1$ und $b < \infty$.

F4) folgt aus F3) für distributive Formen und für lokale Formen mit gleichmäßiger S-Schranke Null (siehe § 4, besonders Satz 3 und Satz 4). Formen, die die Voraussetzungen von Satz 3 oder Satz 4 erfüllen, erfüllen auch die Bedingungen F1), F3) und F4). Für die physikalische Bedeutung von F2) vergleiche man die Diskussion der analogen Bedingung V2) in § 13. In diesem Abschnitt konnten wir uns auf eine Bedingung an die endlichdimensionalen Verteilungen beschränken, da uns die Voraussetzungen F3) und F4) eine Kontrolle von $\sum_{|i|>N} \beta_i(\omega_i\varphi,\varphi)_{x_i}$ für große N erlauben, wie die folgende Proposition zeigt:

Proposition 19: Sind die quadratischen Formen $\zeta_i \in \text{supp } P_{\beta_o}$, so gibt es zu jeder kompakten Menge $K\subset\mathbb{R}^d$ und jeder Zahl $n\in\mathbb{N}$ eine Zahl M_n, so daß für alle

$\varphi,\psi \in \mathcal{H}_{+1}$, für die supp $\varphi \cap$ supp $\psi \subset K$ ist, gilt:

$$\sum_{|i|>M_n} |\zeta_i(\varphi,\psi)_{x_i}| < \frac{1}{n} \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1} .$$

Bew.: Da die Beweistechnik der von Satz 3 sehr verwandt ist, skizzieren wir nur die wichtigsten Schritte:

Ähnlich wie im Beweis von Satz 3 wählen wir Funktionen χ_i und $\tilde{\chi}_i$, $i \in \mathbb{Z}^d$, so daß gilt:

1) $\chi_i, \tilde{\chi}_i \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$; $0 \le \chi_i(x) \le 1$, $0 \le \tilde{\chi}_i(x) \le 1$

2) $\sum_{i \in \mathbb{Z}^d} \chi_i(x) \equiv 1$

3) supp $\chi_i \subset \tilde{C}_i$, supp $\tilde{\chi}_i \subset \tilde{C}_i$

4) $\max_{|i| \le r} \|\nabla \chi_j\|_\infty = A_r < \infty$ $\quad \max_{|i| \le r} \|\nabla \tilde{\chi}_j\| = \tilde{A}_r < \infty$

$B_r := \max \{A_r, \tilde{A}_r\}$.

Es sei $K \subset \mathbb{R}^d$ kompakt. Dann gibt es ein $r \in \mathbb{N}$, so daß $K \subset \bigcup_{|i| \le r} C_i$ gilt.

Gilt supp $\varphi \cap$ supp $\psi \subset K$, so ist:

$$\sum_{|i|>M} |\zeta_i(\varphi,\psi)_{x_i}| \le \sum_{|i|>M} \sum_{|j| \le r} |\zeta_i(\varphi\chi_j, \tilde{\chi}_j\psi)| = (*)$$

Diesen Term schätzen wir wie im Beweis von Satz 3 ab durch:

$$(*) \le \sum_{|i|>M} \sum_{|j| \le r} (a_{j-i} \langle \nabla(\varphi\chi_j), \nabla(\varphi\chi_j)\rangle + b_{j-i} \langle \varphi\chi_j, \varphi\chi_j\rangle)^{1/2}$$

$$(a_{j-i} \langle \nabla(\psi\tilde{\chi}_j), \nabla(\psi\tilde{\chi}_j)\rangle + b_{j-i} \langle \psi\tilde{\chi}_j, \psi\tilde{\chi}_j\rangle)^{1/2}$$

$$\le \sum_{|i|>M} \sum_{|j| \le r} (2a_{j-i} \langle \nabla\varphi, \nabla\varphi\rangle + (2a_{j-i} B_r + b_{j-i}) \langle \varphi, \varphi\rangle)^{1/2}$$

$$(2a_{j-i} \langle \nabla\psi, \nabla\psi\rangle + (2a_{j-i} B_r + b_{j-i}) \langle \psi, \psi\rangle)^{1/2}$$

$$\le [\sum_{|i|>M} \sum_{|j| \le r} (2a_{j-i} + 2a_{j-i} B_r + b_{j-i})] \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1} .$$

Der Faktor $\sum_{|i|>M} \sum_{|j|\leq r} 2(B_r+1)a_{j-i} + b_{j-i}$ wird für großes M beliebig klein, da $\sum_{i\in Z^d} a_i < \infty$ und $\sum_{i\in Z^d} b_i < \infty$. □

Unter einem zulässigen Potential für einen Schrödingeroperator der Gestalt (1) wollen wir eine quadratische Form $\zeta(\varphi,\psi) = \sum_{i\in Z^d} \zeta_i(\varphi,\psi)_{x_i}$ verstehen, für die gilt: $\zeta_i \in \text{supp } P_{\beta_o}$ für alle $i\in Z^d$.

Mit $\mathfrak{Z}$ bezeichnen wir die Klasse aller zulässigen Potentiale, mit $\mathfrak{P}$ die Klasse aller periodischen zulässigen Potentiale. Wie immer bezeichnen wir mit Σ das Spektrum von (fast allen) H_ω.

Analog zu Satz 11 gilt:

Satz 13: Ist ζ ein (für H_ω) zulässiges Potential, so gilt:

$$\sigma(-\Delta + \zeta) \subset \Sigma$$

und

$$\bigcup_{\zeta\in\mathfrak{Z}} \sigma(-\Delta+\zeta) = \Sigma \quad .$$

Bem.: Unter $-\Delta+\zeta$ verstehen wir die Formsumme von $-\Delta$ und ζ.

Für den Beweis des Satzes benötigen wir einige technische Vorbereitungen. Wir skizzieren zunächst die Beweisidee:

Bew.: (Skizze) Aus § 7 wissen wir bereits, daß die Menge $\Omega_o = \{\omega;\sigma(H_\omega) = \Sigma\}$ Wahrscheinlichkeit Eins hat. Ist nun ζ ein beliebiges zulässiges Potential, so konstruieren wir eine Folge $\{\omega_n\}$ in Ω_o so, daß H_{ω_n} im Sinne der starken Resolventenkonvergenz gegen $H_\zeta = -\Delta+\zeta$ strebt. Nach Reed-Simon I [53] Kapitel VIII folgt daraus, daß $\sigma(-\Delta+\zeta)\subset\Sigma$ gilt. □

Zur Konstruktion der ω_n und für den Beweis der starken Resolventenkonvergenz benötigen wir folgende Hilfsmittel:

Proposition 20: Sind ζ_n und ζ relativ zu $H_o = -\Delta$ formbeschränkte quadratische Formen mit gleichmäßigen relativen Konstanten $a < 1$ und $b < \infty$ so gilt:

Gibt es zu jedem $\varphi \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ eine Nullfolge $\alpha_n(\varphi)$, so daß für alle $\psi \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ gilt:

$$|\zeta(\varphi,\psi) - \zeta_n(\varphi,\psi)| \leq \alpha_n(\varphi) \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1}$$

so konvergiert $H_{\zeta_n} = -\Delta + \zeta_n$ im Sinne der starken Resolventenkonvergenz gegen $H_\zeta = -\Delta + \zeta$.

Der Beweis basiert auf dem folgenden Lemma:

Lemma: Unter den Voraussetzungen von Proposition 18 konvergieren die beschränkten Operatoren

$$(H_o+\lambda)^{-1/2}(\zeta-\zeta_n)(H_o+\lambda)^{-1/2}$$

stark gegen Null, wenn λ groß genug ist.

Bew. des Lemmas:

Es seien $\varphi,\psi \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ $\tilde{\varphi} = (H_o+\lambda)^{1/2}\varphi$, $\tilde{\psi} = (H_o+\lambda)^{1/2}\psi$.

Dann gilt:

$$|\langle (H_o+\lambda)^{-1/2}(\zeta-\zeta_n)(H_o+\lambda)^{-1/2}\tilde{\varphi},\tilde{\psi}\rangle|$$

$$= |\zeta(\varphi,\psi) - \zeta_n(\varphi,\psi)| \leq \alpha_n(\varphi) \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1}$$

$$\leq \alpha_n(\varphi) \|(H_o+\lambda)^{1/2}\varphi\| \|(H_o+\lambda)^{1/2}\psi\| \leq \alpha_n(\varphi)\|\tilde{\varphi}\| \|\tilde{\psi}\|$$

falls $\lambda \geq 1$ ist.

Also konvergiert für festes $\lambda \geq 1$

$$(H_o+\lambda)^{-1/2}(\zeta-\zeta_n)(H_o+\lambda)^{-1/2}\varphi$$

gegen Null für alle $\varphi \in (H_o+\lambda)^{1/2}C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Da $(H_o+\lambda)^{1/2}C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ in $L^2(\mathbb{R}^d)$ dicht liegt, folgt daraus die starke Konvergenz, wenn die Operatornormen $\|(H_o+\lambda)^{-1/2}\zeta_n(H_o+\lambda)^{-1/2}\|$ beschränkt sind (vgl. Weidmann [61]).

Es gilt:

$$|<(H_o+\lambda)^{-1/2}\zeta_n(H_o+\lambda)^{-1/2}\varphi,\psi>|$$

$$\leq \quad \zeta_n((H_o+\lambda)^{-1/2}\varphi,\ (H_o+\lambda)^{-1/2}\psi)$$

$$\leq \quad \|(aH_o+b)^{1/2}(H_o+\lambda)^{-1/2}\varphi\| \quad \|(aH_o+b)^{1/2}(H_o+\lambda)^{-1/2}\psi\|$$

(da die ζ_n gleichmäßig formbeschränkt sind.)

$$\leq \quad a\,\|\varphi\|\ \|\psi\| \quad \text{falls } \lambda > b/a \text{ ist.}$$

Also ist die Operatornorm $\|(H_o+\lambda)^{-1/2}\zeta_n(H_o+\lambda)^{-1/2}\| \leq a < 1$, wenn $\lambda > b/a$ ist. □

Wir kommen nun zum Beweis von Proposition 20.

Bew. der Proposition:

Durch Anwenden der Resolventengleichung erhält man für $\lambda > b/a$

$$(H_o+\zeta+\lambda)^{-1} - (H_o+\zeta_n+\lambda)^{-1}$$

$$= (H_o+\lambda)^{-1/2}\,[(1 + (H_o+\lambda)^{-1/2}\,\zeta(H_o+\lambda)^{-1/2})^{-1}$$

$$- (1 + (H_o+\lambda)^{-1/2}\zeta_n(H_o+\lambda)^{-1/2})^{-1}]\ \ (H_o+\lambda)^{-1/2}$$

$$= (H_o+\lambda)^{-1/2}[(1+(H_o+\lambda)^{-1/2}\zeta_n(H_o+\lambda)^{-1/2})^{-1}((H_o+\lambda)^{-1/2}(\zeta_n-\zeta)(H_o+\lambda)^{-1/2})$$

$$(1 + (H_o+\lambda)^{-1/2}\zeta(H_o+\lambda)^{-1/2})^{-1}]\ (H_o+\lambda)^{-1/2} \qquad (*)$$

Dabei sind die Operatoren $(1+(H_o+\lambda)^{-1/2}\zeta(H_o+\lambda)^{-1/2})$ und $(1+(H_o+\lambda)^{-1/2}\zeta_n(H_o+\lambda)^{-1/2})$ invertierbar, da die Operatornormen durch $a < 1$ beschränkt sind (vgl. Beweis des Lemmas). Infolge dessen sind auch die Operatornormen der inversen Operatoren beschränkt.

Daraus und aus der starken Konvergenz von $(H_o+\lambda)^{-1/2}(\zeta_n-\zeta)(H_o+\lambda)^{-1/2}$ folgt,

daß der Ausdruck auf der rechten Seite von (*) stark gegen Null konvergiert, also auch $(H_o+\zeta+\lambda)^{-1}-(H_o+\zeta_n+\lambda)^{-1}$ für $\lambda > b/a$. Daraus folgt die starke Resolventenkonvergenz von $H_o+\zeta_n$ gegen $H_o+\zeta$. □

Wir kehren nun zum Beweis von Satz 13 zurück:

Bew. von Satz 13 (Fortsetzung):

Es sei K_n eine aufsteigende Folge kompakter Mengen in $\mathbb{R}^d$, so daß $\bigcup_{n\in\mathbb{N}} K_n = \mathbb{R}^d$ ist.
Nach Proposition 19 gibt es zu jedem $n\in\mathbb{N}$ eine Zahl L_n, so daß

$$\sum_{|i|>L_n} |q_i(\varphi,\psi)_{x_i}| < \frac{1}{3n}$$

für alle $\varphi,\psi \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ mit supp $\varphi \subset K_n$ und beliebige Formen $q_i \in$ supp P_{β_o} gilt.

Nun sei $\zeta = \sum_{i\in Z^d} (\zeta_i)_{x_i}$ ein beliebiges zulässiges Potential.

Wir setzen für $n \geq 1$: $\Omega_n = \{\omega ; \|\beta_i(\omega)-\zeta_i\|_\infty < \frac{1}{3n(2L_n+1)^d}$ für $|i| \leq L_n\}$

und $\Omega_o = \{\omega;\sigma(H_\omega) = \Sigma\}$.

Wegen $\zeta_i \in$ supp P_{β_o} und wegen F2) folgt $P(\Omega_n) > 0$. Wegen $P(\Omega_o) = 1$, also auch $P(\Omega_o \cap \Omega_n) > 0$.

Wir wählen ein $\omega_n \in \Omega_n \cap \Omega_o$ - dann ist also insbesondere $\sigma(H_{\omega_n}) = \Sigma$ - und zeigen, daß $H_{\omega_n} = -\Delta + \zeta_{\omega_n} = -\Delta + \sum_{i\in Z^d} \beta_i(\omega_n)_{x_i}$ im Sinne der starken Resolventenkonvergenz gegen $H_\zeta = -\Delta + \zeta$ konvergiert.

Für $\varphi,\psi \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$, supp $\varphi \subset K_n$ gilt:

$$|\zeta(\varphi,\psi)-\zeta_{\omega_n}(\varphi,\psi)| \leq \sum_{|i|>L_n} |\zeta_i(\varphi,\psi)x_i| + \sum_{|i|>L_n} |\beta_i(\omega_n,\varphi,\psi)x_i|$$

$$+ \sum_{|i|\leq L_n} |\zeta_i(\varphi,\psi)x_i - \beta_i(\omega_n,\varphi,\psi)x_i|$$

$$< \frac{1}{3n} \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1} + \frac{1}{3n}\|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1} + \sum_{|i|\leq L_n} \|\zeta_i-\beta_i(\omega)\|_\infty \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1}$$

$$< \frac{1}{n} \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1} .$$

Folglich gibt es zu festem φ eine Nullfolge $\alpha_n(\varphi)$, so daß

$$|\zeta(\varphi,\psi) -\zeta_{\omega_n}(\varphi,\psi)| \leq \alpha_n(\varphi) \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1}$$

ist. Wir können also Proposition 20 anwenden und erhalten die starke Resolventenkonvergenz.

Damit ist Satz 13 bewiesen. □

Analog zu Satz 12 gilt auch im Falle von Formsummen:

Satz 14: Erfüllt $H_\omega = -\Delta + \zeta_\omega$ die Voraussetzungen F1) - F4) und bezeichnet $\mathcal{P}$ die Klasse aller für H_ω zulässigen, periodischen Potentiale, so gilt:

$$\Sigma = \overline{\bigcup_{W\in\mathcal{P}} \sigma(-\Delta+W)}$$

Bew.: Wie im Beweis von Satz 13 genügt es zu zeigen, daß für jedes zulässige Potential W der Operator $H_W = -\Delta + W$ im Sinne der starken Resolventenkonvergenz Grenzwert von Operatoren $H_{W_n} = -\Delta + W_n$ mit periodischen, zulässigen Potentialen ist.

Dazu sei $\varphi\in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ fest gewählt.

Dann gibt es nach Proposition 19 zu jedem $n\in\mathbb{N}$ eine Zahl M_n, so daß

$$\sum_{|i|>M_n} |q_i(\varphi,\psi)x_i| < \frac{1}{2n} \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1}$$

für alle $\psi\in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ und $q_i\in \operatorname{supp} P_{\beta_o}$ gilt.

Ist nun ζ ein beliebiges zulässiges Potential $\zeta = \sum_{i \in Z^d} (\zeta_i)_{x_i}$, so wähle man

$$\zeta_i^{(n)} = \zeta_i \text{ für } |i| \leq M_n$$

und setze $\zeta_i^{(n)}$ periodisch fort. Wir definieren $\zeta_n = \sum_{i \in Z^d} (\zeta_i^{(n)})_{x_i}$.

Dann gilt:

$$|\zeta(\varphi,\psi) - \zeta_n(\varphi,\psi)| \leq \sum_{|i|>M_n} |\zeta_i(\varphi,\psi)_{x_i}| + \sum_{|i|>M_n} |\zeta_i^{(n)}(\varphi,\psi)_{x_i}|$$

$$< \frac{1}{n} \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1} .$$

Folglich gibt es zu $\varphi \in C_o^\infty(\mathbb{R}^d)$ eine Nullfolge $\alpha_n(\varphi)$, so daß

$$|\zeta(\varphi,\psi) - \zeta_n(\varphi,\psi)| < \alpha_n(\varphi) \|\varphi\|_{+1} \|\psi\|_{+1}$$

gilt. Mit Hilfe von Proposition 20 folgt daher die starke Resolventenkonvergenz von H_{ζ_n} gegen H_ζ. □

Anwendungen zu diesem Satz geben wir im folgenden Abschnitt.

§ 15. Existenz von Energielücken

In § 13 haben wir für die dort untersuchten stochastischen Operatoren eine Bänderstruktur gefunden, genauer die Spektren Σ sind Abschlüsse von Mengen der Gestalt $\bigcup [a_i,b_i]$. Dabei konnten wir nicht ausschließen, daß die Intervalle $[a_i,b_i]$ derart überlappen, daß Σ die ganze reelle Achse oder eine Halbachse darstellt.

In diesem Kapitel entwickeln wir Kriterien dafür, daß Σ Lücken (engl. "gaps") hat, d.h. daß es Intervalle a,b gibt, so daß $]a,b[\cap \Sigma = \emptyset$, aber $]-\infty,b[\cap \Sigma \neq \emptyset$ und $]a,\infty[\cap \Sigma \neq \emptyset$ ist.

Physikalisch entspricht solchen Lücken die Existenz von "verbotenen Zonen" für die Energie von Elektronen in dem betrachteten Festkörper.

Für stochastische Operatoren H_ω, die die Bedingungen von § 13 oder § 14 erfüllen folgt aus den Sätzen 12 und 14:

Proposition 21: $]a,b[\cap \Sigma = \emptyset$ dann und nur dann, wenn $]a,b[\cap \sigma(-\Delta+W) = \emptyset$ für alle zulässigen periodischen Potentiale (bzw. Formen).

Bew.: folgt unmittelbar aus Satz 12 bzw. 14. □

Leider kennt man in der Regel die Spektren $\sigma(-\Delta+W)$ auch für periodische zulässige Potentiale nicht gut genug, um das Korollar direkt auf Beispiele anwenden zu können. Eine Hauptschwierigkeit besteht darin, daß unter den periodischen zulässigen Potentialen solche mit beliebig großen Perioden vorkommen!

Es wäre daher wünschenswert Kriterien für die Existenz von Energielücken zu haben, die nur die Untersuchung von periodischen Operatoren erfordert,

deren Periode die Grundperiode, d.h. die Periode des Gitters $\{x_i\}_{i\in Z^d}$ ist. Physikalisch entsprechen solchen Operatoren "reine" Kristalle, d.h. ideale Kristalle mit völlig regelmäßigen Einheitszellen C_i. Den periodischen zulässigen Potentialen entsprechen "regelmäßig gemischte" Kristalle, d.h. ideale Kristalle, deren Einheitszelle (u.U. sehr viel) größer ist als C_o und die eine Mischung aus verschiedenen Arten von Kraftzentren enthalten kann.

Im Jahre 1949 vermuteten Saxon und Hutner [54], daß eine gemeinsame Energielücke von zwei reinen Kristallen mit Punktwechselwirkung

$$(H_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + \lambda_1 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x-n),\ H_2 = -\frac{d^2}{dx^2} + \lambda_2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x-n))$$

auch für jedes gemischte Kristall, mathematisch ausgedrückt für den stochastischen Operator $H_\omega = -\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda_n(\omega)\delta(x-n)$ ($\lambda_i(\omega)=\lambda_1$ oder $\lambda_i(\omega)=\lambda_2$), ebenfalls eine Energielücke sei. Diese Vermutung wurde 1951 von Luttinger [40] bewiesen. Jedoch stellte sich bereits bald (Kerner [29] 1954) heraus, daß die Saxon-Hutner-Vermutung für andere als δ-Potentiale im allgemeinen nicht richtig war.

Die folgenden Sätze sind Modifikationen der Saxon-Hutner-Vermutung, die für ziemlich allgemeine Potentiale gelten.
Insbesondere erhalten wir Luttingers Ergebnis als Spezialfall unserer Ergebnisse.

Aus der speziellen Struktur des Kronig-Penney Modells (d.h. Punktwechselwirkung) läßt sich aus unseren Ergebnissen verstehen, warum die Saxon-Hutner-Vermutung hier richtig ist. Für dieses Modell können wir das Spektrum Σ von H_ω sogar explizit - bis auf Lösen algebraischer Gleichungen - bestimmen.

Ehe wir zu den angekündigten Sätzen kommen, benötigen wir einige Ergebnisse aus der Theorie der Schrödingeroperatoren mit periodischen Potentialen, die wir im wesentlichen Reed-Simon IV [53] und Eastham [14] entnehmen.

Wir beschränken uns darauf, Notationen einzuführen und im folgenden benötigte Resultate bereitzustellen. Es bezeichne $H = -\Delta + V$ einen Schrödingeroperator. V sei hierbei eine formbeschränkte Störung von $H_o = -\Delta$ (Funktion oder quadratis Form). Wir wollen im folgenden quadratische Formen im Hinblick auf die Anwendung einschließen.

V soll periodisch sein, d.h. es gibt eine (Vektorraum-)Basis $a_1, —, a_d$ von $\mathbb{R}^d$, so daß

$$V(x+a_i) = V(x) \quad i=1,\ldots,d$$

gilt. Mit Q bezeichnen wir die Menge $Q = \{x\in\mathbb{R}^d;\ x = \sum_{i=1}^{n} t_i a_i,\ 0 \le t_i < 1\}$. Dann ist H unitär äquivalent zum direkten Integral sogenannter reduzierter Schrödingeroperatoren $H(\theta)$ auf $L^2(Q)$:

$$H \tilde{=} \int_{[0,2\pi[^d}^{\oplus} H(\theta)d\theta \qquad (1)$$

Ist V operatorbeschränkt bezüglich $H_o = -\Delta$, so ist $H(\theta) = H_o(\theta) + V$ auf $L^2(Q)$, wobei $H_o(\theta) = -\Delta$ auf $L^2(Q)$ ist mit Randbedingungen:

$$\varphi(x+a_j) = e^{i\theta_j}\varphi(x);\ \frac{\partial\varphi}{\partial y_j}(x+a_j) = e^{i\theta_j}\frac{\partial\varphi}{\partial y_j}(x)$$

für alle $x\in\overline{Q}$, für die auch $x+a_j\in\overline{Q}$ ist.

V ist dann operatorbeschränkt bezüglich $H_o(\theta)$.

Ist V eine quadratische Form, formbeschränkt bezüglich H_o, so setzen wir im folgenden voraus, daß V auch als formbeschränkte Störung von $H_o(\theta)$ aufgefaßt werden kann. Dies ist z.B. der Fall für beschränkte Borelmaße auf Q falls d=1 is und für Funktionen aus $L^p(Q)$ mit $p>1$ falls d=2 $p\ge\frac{d}{2}$ falls $d\ge 3$ ist (vgl. Avro Grossmann und Rodriguez [6]).

Dann haben die Operatoren $H(\theta)$ rein diskrete Spektren.

Wir bezeichnen mit $\{E_n(\theta)\}_{n\in\mathbb{N}}$ die Folge der Eigenwerte des Operators $H(\theta)$ so geordnet, daß

$$E_n(\theta) \leq E_{n+1}(\theta)$$

ist und ein k-facher Eigenwert in der Folge k-mal auftritt. Die $E_n(\theta)$ sind für festes n stetig als Funktionen von θ und die Mengen $B_n = \{E_n(\theta);\ \theta\in[0,2\pi[^d\}$ sind kompakte Intervalle. Wir nennen B_n das n-te Band des Operators H. Wir nennen $\Gamma_n = \{\lambda\in\mathbb{R};\ \lambda_n < \lambda < \lambda_{n+1}$ für alle $\lambda_n\in B_n$, $\lambda_{n+1}\in B_{n+1}\}$ die n-te Energielücke von H. Γ_n kann leer sein, da i.a. B_n und B_{n+1} überlappen. Aus Gleichung (1) folgt, daß $\sigma(H) = \bigcup_{n=1}^{\infty} B_n$ gilt.
Ein periodisches Potential mit Basiszelle $Q = \{x\in\mathbb{R}^d,\ x = \sum_{i=1}^{d} t_i a_i\ 0\leq t_i < 1\}$ kann auch als periodisches Potential mit der Basiszelle $Q_\alpha = \{x\in\mathbb{R}^d;\ x = \sum_{i=1}^{d} t_i a_i\ \ 0\leq t_i < \alpha_i\}$ für $\alpha\in Z^d;\ \alpha_i \neq 0$ für i=1,...,d, aufgefaßt werden.

Bezeichnen wir mit $H_\alpha(\theta)$ die bezüglich Q_α gebildeten reduzierten Schrödingeroperatoren, so gilt:

$$H \tilde{=} \int_{[0,2\pi[^d}^{\oplus} H(\theta)d\theta \tilde{=} \int_{[0,2\pi[^d}^{\oplus} H_\alpha(\theta)d\theta$$

Infolgedessen stimmen die Mengen $\{E_n(\theta);\ n\in\mathbb{N},\ \theta\in[0,2\pi[^d\}$ und $\{E_n^{(\alpha)}(\theta);\ n\in\mathbb{N},\ \theta\in[0,2\pi[^d\}$ überein, wenn $E_n^{(\alpha)}(\theta)$ die Eigenwerte von $H_\alpha(\theta)$ bezeichnet.

Wir bezeichnen mit $B_n^{(\alpha)}$ das n-te Band von H bezüglich Q_α, also $B_n^{(\alpha)} = \{E_n^{(\alpha)}(\theta);\ \theta\in[0,2\pi[^d\}$.

Im Beweis von Satz 15 benötigen wir den folgenden Zusammenhang zwischen den Bändern B_n und $B_n^{(\alpha)}$:

Proposition 22: Ist $B_n \cap B_{n+1} = \emptyset$, so gilt:

$$\bigcup_{j=1}^{n} B_j = \bigcup_{k=1}^{M} B_k^{(\alpha)} ,$$

wobei

$$M = n \cdot \prod_{j=1}^{d} \alpha_j \text{ ist.}$$

Bew.: Wir bezeichnen mit $\{a_k\}$ die Folge der Eigenwerte von $H_\alpha(0)$ so geordnet, daß $a_k \leq a_{k+1}$ ist und so daß ein m-facher Eigenwert auch m-mal in $\{a_k\}$ auftritt. Mit $\{b_k\}$ bezeichnen wir die Folge, die aus den Eigenwerten der der $H(\theta)$ gebildet ist, für die $\theta = (\theta_1, —, \theta_d)$ für die

$$e^{i\alpha_j\theta_j} = 1 \text{ für } j = 1,—,d \qquad (2)$$

gilt. Wieder soll: $b_k \leq b_{k+1}$ sein und jeder Eigenwert entsprechend seiner Gesamtvielfachheit auftreten.

Aus Theorem 6.2.1 in Eastham [14] folgt, daß die Folgen $\{a_k\}$ und $\{b_k\}$ übereinstimmen, daß also $a_k = b_k$ für alle $k \in \mathbb{N}$ gilt.

In der Menge $B = \bigcup_{j=1}^{n} B_j$ liegen laut Definition der B_j gerade die $M = n \cdot \prod_{j=1}^{d} \alpha_j$ ersten Glieder der Folge $\{b_k\}$, alle anderen Glieder der Folge $\{b_k\}$ liegen wegen $B_n \cap B_{n+1} = \emptyset$ nicht in B. Also liegen in B gerade die $a_j = b_j$ für $j=1,\ldots,M$ alle anderen a_j nicht. Die a_j liegen nach Definition in B_j. Da die $B_j^{(\alpha)}$ abgeschlossene Intervalle sind und für alle $\lambda \in \Gamma_n = \{x; x_n < x < x_{n+1} \text{ für alle } x_n \in B_n, x_{n+1} \in B_{n+1}\}$ gilt $\lambda \notin \bigcup_{j\in\mathbb{N}} B_j^{(\alpha)}$, folgt, daß $B = \bigcup_{j=1}^{M} B_j^{(\alpha)}$ gilt, was zu beweisen war. □

Nach diesem Exkurs über periodische Schrödingeroperatoren wenden wir uns den angekündigten Sätzen über Energielücken im Spektrum stochastischer Operatoren zu.

Wir beweisen zunächst ein ziemlich allgemeines und ziemlich abstraktes Resultat und spezialisieren dann auf interessante Beispiele.

Im folgenden können jeweils für die Symbole f, φ etc. Funktionen oder quadratische Formen eingesetzt werden. Von V_ω setzen wir zunächst nur voraus, daß V_ω von der Gestalt:

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x - x_i)$$

ist und, daß V1) - V4) aus § 13 bzw. F1) - F4) aus §14 gelten. Ist U ein periodisches Potential, so bezeichne Q_U seine Einheitszelle. Für $\alpha \in Z^d$ sei $(Q_U)_\alpha = \{x ; x = \sum_{j=1}^{d} \alpha_j y_j$ für ein $y = (y_1, —, y_d) \in Q_U\}$.

$\{E_n^{(\alpha)}(\theta, U)\}$ sei die Folge der Eigenwerte von $H_U^{(\alpha)}(\theta)$, wobei $H_U = -\Delta + U$ ist und $H_U^{(\alpha)}(\theta)$ der bezüglich $(Q_U)_\alpha$ gebildete reduzierte Schrödingeroperator. Die Folge $\{E_n^{(\alpha)}(\theta, U)\}$ sei aufsteigend geordnet und ein k-facher Eigenwert trete k-mal auf.

Für ein zulässiges periodisches Potential W ist $Q_W = C_\alpha$ für ein $\alpha \in Z^d$, wobei $C_\alpha = (C_o)_\alpha$ ist und C_o die Einheitszelle des zu $V_\omega(x) = \Sigma f_i(\omega, x - x_i)$ gehörigen Gitters $\{x_i\}_{i \in Z^d}$ ist. Wir nennen eine Menge Φ von Funktionen (oder Formen) hinreichend für V_ω, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

H1) Jedes $F \in \Phi$ ist periodisch mit einer Einheitszelle C_F (die i.a. von F abhängt).

H2) Ist W ein zulässiges periodisches Potential und ist $\lambda \in \sigma(H_W)$,
so gibt es Funktionen (bzw. Formen) $\underline{F}$ und $\overline{F}$ in Φ,
so daß $E_n^{(\alpha)}(\theta,\underline{F}) \leq \lambda \leq E_n^{(\alpha)}(\theta,\overline{F})$ gilt, für gewisse $\alpha \in Z^d$, $\theta \in [0,2\pi[^d$
und $n \in \mathbb{N}$.
Die Menge aller periodischen zulässigen Potentiale ist ein triviales Beispiel für eine hinreichende Menge.

Daß der Begriff der hinreichenden Menge nützlich ist, wird sich im folgenden Satz 15, insbesondere aber bei den Beispielen erweisen.
Satz 15 gibt ein allgemeines Kriterium für die Existenz von Energielücken:

Satz 15: Ist Φ eine für $V_\omega = \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega, x-x_i)$ hinreichende Menge und gilt für die offene Menge $\Gamma \subset \mathbb{R}$:

$$\Gamma \subset \bigcap_{F \in \Phi} \Gamma_m(-\Delta + F) \text{ für ein festes } m \in \mathbb{N}, \qquad (3)$$

so gilt $\Gamma \cap \Sigma = \emptyset$, also $\Gamma \cap \sigma(H_\omega) = \emptyset$ fast sicher.

Bew.: Ist $\lambda \in \Gamma$, so gilt für alle $F \in \Phi$ wegen (3)

$$\begin{aligned} E_n(\theta,F) &< \lambda \quad \text{für } \theta \in [0,2\pi[^d \text{ und } n \leq M \\ E_n(\theta,F) &> \lambda \quad \text{für } \theta \in [0,2\pi[^d \text{ und } n > m \end{aligned} \qquad (*)$$

Da ferner, ebenfalls wegen (3), die Bänder $B_m(F)$ und $B_{m+1}(F)$ von $H_F = -\Delta + F$ leeren Durchschnitt haben, folgt aus Proposition 22 und (*), daß für beliebiges $\alpha \in Z^d$ gilt:

$$\begin{aligned} E_n^{(\alpha)}(\theta,F) &< \lambda \quad \text{für } \theta \in [0,2\pi[^d \text{ und } n \leq m \prod_{j=1}^{d} \alpha_j \\ E_n^{(\alpha)}(\theta,F) &> \lambda \quad \text{für } \theta \in [0,2\pi[^d \text{ und } n > m \prod_{j=1}^{d} \alpha_j \quad . \end{aligned}$$

Dann kann λ wegen Punkt 2) der Definition hinreichender Mengen nicht im Spektrum $\sigma(H_W)$ eines zulässigen periodischen Potentials liegen.

Es gilt also:

$$\Gamma \cap \bigcup_{W \in \mathfrak{P}} \sigma(H_W) = \emptyset.$$

Da Γ offen ist, folgt

$$\Gamma \cap \overline{\bigcup_{W \in \mathfrak{P}} \sigma(H_W)} = \emptyset$$

Nach Satz 12 bzw. 14 ist jedoch

$$\overline{\bigcup_{W \in \mathfrak{P}} \sigma(H_W)} = \Sigma,$$

also folgt $\Gamma \cap \Sigma = \emptyset$. □

Manchmal ist es schwierig festzustellen, welchen Index eine gegebene Energielücke hat, insbesondere dann, wenn das Spektrum eines periodischen Schrödingeroperators nicht aus dem Eigenwert der reduzierten Operatoren bestimmt wurde. In diesen Fällen ist der folgende Satz 16 nützlich.

Wir nennen eine Teilmenge A eines Banachraumes X wegzusammenhängend, wenn es zu $a_1, a_2 \in A$ eine stetige Abbildung φ: $[0,1] \to X$ gibt, so daß $\varphi(0) = a_1$, $\varphi(1) = a_2$ und $\varphi([0,1]) \subset A$ ist.

Satz 16: Ist Φ eine wegzusammenhängende Teilmenge des Banachraumes B (siehe § 14), die eine hinreichende Menge für V_ω ist und gibt es für die (periodischen) Formen $F \in \Phi$ eine von F unabhängige Einheitszelle Q, so folgt für jede offene Menge Γ aus

$$\Gamma \cap \sigma(-\Delta + F) = \emptyset \quad \text{für alle } F \in \Phi$$

daß

$$\Gamma \cap \Sigma = \emptyset \quad \text{gilt.}$$

Bem.: Für die Anwendungen in der vorliegenden Arbeit ist die zusätzliche Voraussetzung, daß die $F \in \Phi$ gleiche Perioden haben, immer erfüllt. In einer gemein-

samen Arbeit mit F. Martinelli [32b] werden wir jedoch Anwendungen von Satz 15 geben, in denen diese Voraussetzung nicht erfüllt ist.

Bew.: Es sei $\gamma \in \Gamma$ und Γ_o eine offene zusammenhängende Umgebung von γ. Dann gibt es zu jedem $F \in \Phi$ einen Index $m(F)$, so daß $\Gamma_o \subset \Gamma_{m(F)}(-\Delta + F)$ gilt. Können wir zeigen, daß wir den Index $m = m(F)$ von F unabhängig wählen können, so ergibt eine Anwendung von Satz 15, daß $\Gamma_o \cap \Sigma = \emptyset$ ist, folglich $\Gamma \cap \Sigma = \emptyset$ gil

Sei etwa $\gamma \in \Gamma_{m_1}(-\Delta + F_1)$, $\gamma \in \Gamma_{m_2}(-\Delta + F_2)$ für ein $m_2 > m_1$, aber $\gamma \notin \Gamma_{m_1}(-\Delta + F_2)$.

Wir wollen diese Annahme zum Widerspruch führen.

Da Φ wegzusammenhängend ist, gibt es eine stetige Funktion $\varphi\colon [0,1] \to \Phi$, mit $\varphi(0) = F_1$ und $\varphi(1) = F_2$.

Zu gegebenem $m \in \mathbb{N}$ betrachten wir die Funktion $f_n\colon [0,1] \to \mathbb{R}$, $f_n(t) = E_n(0,\varphi(t)$ wobei - wie üblich - $E_n(\theta,V)$ den n-ten Eigenwert des reduzierten Schrödingeroperators $H(\theta)$ zu $H = -\Delta + V$ bezeichnet.

Aus Reed-Simon I [53] Theorem VIII.25 c folgt, daß $(H_o + \varphi(t_n))(0)$ gegen $(H_o + \varphi(t_o))(0)$ im Sinne der Norm-Resolventenkonvergenz strebt, wenn $t_n \to t_o$ strebt. Nach Theorem VIII.23 b) im gleichen Buch folgt daraus, daß $f_n(t)$ für festes $n \in \mathbb{N}$ eine stetige Funktion in t ist. Wegen (*) ist $f_{m_1+1}(1) = E_{m_1+1}(0,F_2) < \gamma$ und $f_{m_1+1}(0) = E_{m_1+1}(0,F_1) > \gamma$, folglich gibt es ein $t \in [0,1]$, so daß $f_{m_1+1}(t) = E_{m_1+1}(0,\varphi(t)) = \gamma$ ist. Daraus folgt jedoch, daß $\gamma \in \sigma(-\Delta + \varphi(t))$ liegt, was wegen $\varphi(t) \in \Phi$ und $\gamma \in \Gamma$ der Voraussetzung

$$\Gamma \cap \sigma(-\Delta + F) = \emptyset \text{ für alle } F \in \Phi$$

widerspricht. Die Annahme (*) führt also zum Widerspruch. □

Wir wenden Satz 15 und Satz 16 im Falle

$$V_\omega(x) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} q_i(\omega) f(x - x_i)$$

an. Hierbei soll f - wie üblich - im Raum $L^p(l^1)$ liegen oder eine summierbar beschränkte quadratische Form sein und q_i so gewählt sein, daß die Bedingungen V1) - V4) bzw. F1) - F4) erfüllt sind.

Ferner nehmen wir an, daß $f(x) \geq 0$ für alle $x \in \mathbb{R}^d$ ist und ebenso $q_i(\omega) \geq 0$ fast sicher gilt. Die Fälle $f(x) \leq 0$, $q_i(\omega) \geq 0$ etc. lassen sich jedoch genauso wie im folgenden behandeln.

In diesem Falle gibt es besonders einfache hinreichende Mengen:

Satz 17: Ist $f \geq 0$, supp $P_{q_o} \subset [0,\infty[$, $V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} q_i(\omega) f(x-x_i)$

$c_o = \inf(\text{supp } P_{q_o})$, $c_1 = \sup(\text{supp } P_{q_o})$, so gilt:

a) Ist $c_1 < \infty$ und gilt für die offene Menge Γ

$$\Gamma \subset \Gamma_m(-\Delta + c_o \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i)) \cap \Gamma_m(-\Delta + c_1 \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i))$$

so gilt

$$\Gamma \cap \Sigma = \phi$$

b) Ist $c_i = \infty$, $d_n \to \infty$ und gilt für die offene Menge Γ

$$\Gamma \subset \Gamma_m(-\Delta + c_o \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i)) \cap \bigcup_{n=1}^{\infty} \Gamma_m(-\Delta + d_n \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i))$$

so gilt:

$$\Gamma \cap \Sigma = \phi .$$

Satz 17 ist eine Modifikation der Saxon-Hutner-Vermutung. Während Saxon und Hutner nur verlangten, daß Γ eine gemeinsame Energielücke für die "reinen Kristalle" ist, verlangt Satz 17, daß außerdem die Zählung der Energielücken gleich ist.

Bew.: Wir haben zu zeigen, daß $\Phi = \{c_o \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i), c_1 \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i)\}$ eine hinreichende Menge für V_ω ist.

Bedingung 1) für hinreichende Mengen ist natürlich erfüllt. Ist nun W ein

periodisches zulässiges Potential, $W = \sum_{i \in Z^d} b_i f(x-x_i)$ so folgt aus

$c_o \leq b_i \leq c_1$ für alle $i \in Z^d$, und $f(x) \geq 0$, daß

$V_o(x) := c_o \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i) \leq W(x) \leq V_1(x) := c_1 \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i)$ gilt und daher, wenn C_α die Einheitszelle von W ist:

$$H_{V_o}^{(\alpha)}(\theta) \leq H_w(\theta) \leq H_{V_1}^{(\alpha)}(\theta)$$

(insbesondere sind die Formdomänen dieser Operatoren gleich).

Aus dieser Ungleichung und dem Minimax-Prinzip (Reed-Simon IV [53] Theorem XII

folgt, daß

$$E_n^{(\alpha)}(\theta, V_o) \leq E_n(\theta, W) \leq E_n^{(\alpha)}(\theta, V_1)$$

für alle $n \in \mathbb{N}$ und $\theta \in [0, 2\pi[^d$. Also ist auch H2) erfüllt. Folglich ist Φ in der Tat eine hinreichende Menge und die Behauptung folgt aus Satz 15.

Teil b) zeigt man analog. □

Es bezeichne $\alpha_n(W)$ die untere, $\beta_n(W)$ die obere Grenze des Bandes $B_n(W)$ des periodischen Potentials W.

Korollar 1: Ist $c_o > 0$, $c_1 < \infty$ und $\alpha_{n+1}(V_o) > \frac{c_1}{c_o} \beta_n(V_o)$ so gilt:

$$\left] \frac{c_1}{c_o} \beta_n(V_o), \alpha_{n+1}(V_o) \right[\cap \Sigma = \phi .$$

Bew.: Wegen:

$$\langle \nabla\varphi, \nabla\varphi \rangle + \langle V_1\varphi, \varphi \rangle \leq \frac{c_1}{c_o} (\langle \nabla\varphi, \nabla\varphi \rangle + \langle V_o\varphi, \varphi \rangle)$$

folgt aus dem Mini-max-Prinzip:

$$E_n(\theta, V_1) \leq \frac{c_1}{c_o} E_n(\theta, V_o)$$

also $\beta_n(V_1) \leq \frac{c_i}{c_o} \beta_n(V_o)$

folglich gilt:

$$\left]\frac{c_1}{c_o}\ \beta_n(V_o),\ \alpha_{n+1}(V_o)\right[\subset \Gamma_n(-\Delta + V_o) \cap \Gamma_n(-\Delta + V_1)$$

und daraus folgt mittels Satz 16 die Behauptung. □

Mit Hilfe von Satz 16 erhält man das Korollar 2:

Korollar 2: Ist $V_\omega(x) = \sum_{i \in Z^d} q_i(\omega) f(x-x_i)$ und $f \geq 0$, so gilt:

Für jede offene Menge Γ folgt aus

$$\Gamma \cap \sigma(-\Delta + \lambda \sum_{i \in Z^d} f(x-x_i)) = \phi$$

für alle λ aus der Zusammenhangskomponente von supp P_{q_o}, daß

$$\Gamma \cap \Sigma = \phi \ .$$

Als Anwendung von Satz 17 betrachten wir das stochastische Kronig-Penney-Modell: $V_\omega(x) = \Sigma q_i(\omega)\delta(x-x_i)$ (mit den Voraussetzungen F1) - F4)). Es sei $x_i = i \in Z$. Es sei wieder $c_o = \inf(\text{supp } P_{q_o})$, $c_1 = \sup(\text{supp } P_{q_o}) < \infty$. Kronig und Penney [34] berechnen die Bänder von $H_\lambda = -\frac{d^2}{dx^2} + \lambda \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x-n)$ zu: $B_n = [f_n(\lambda); n^2\pi^2]$ wobei $f_n(\lambda)$ in λ antiton ist und $f_n(\lambda) > (n-1)^2\pi^2$ gilt. Das Ungewöhnliche an diesem Modell ist, daß die oberen Bandgrenzen nicht von der Kopplungskonstanten abhängen!

Infolgedessen ist $\sigma(H_{c_1}) \subset \sigma(H_{c_o})$, daher folgt aus Satz 16, daß $\Sigma \subset \sigma(H_{c_o})$ ist. Andererseits ist $V_o(x) = C_o \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x-n)$ ein zulässiges Potential, also folgt aus Satz 14, daß $\sigma(H_{c_o}) \subset \Sigma$ ist. Wir haben also gezeigt:

Proposition 23: $\sigma(-\frac{d^2}{dx^2} + \Sigma q_i(\omega)\delta(x-x_i)) = \sigma(-\frac{d^2}{dx^2} + c_o\ \Sigma\delta(x-x_i))$ fast sicher.

Die Saxon-Hutner-Vermutung ist für das Kronig-Penney-Modell also richtig, da"gemeinsame Energielücken der reinen Kristalle" automatisch auch im Index überein-

stimmen, d.h. aus $\Gamma_n(V_o) \cap \Gamma_k(V_1) \neq \phi$ folgt $n = k$, also $\Gamma_n(V_o) \cap \Gamma_n(V_1) \neq \phi$.
Dies rührt daher, daß die oberen Bandgrenzen im Kronig-Penney-Modell von der Kopplungskonstanten unabhängig sind.

Als eine weitere Anwendung der Sätze 15 und 16 untersuchen wir nun ein stochastisches Kronig-Penney-Modell mit endlichen Potentialstufen.

Dazu sei:

$$f_i(\omega,x) = \lambda_o \chi_{]\xi_i(\omega)-\eta_i(\omega),\xi_i(\omega)+\eta_i(\omega)[}(x)$$

mit den üblichen Annahmen V1) - V4) sowie

$$-\frac{1}{2} < C_1 \leq \xi_i(\omega) - \eta_i(\omega) \leq C_2 < 0 < C_3 \leq \xi_i(\omega) + \eta_i(\omega) \leq C_4 < \frac{1}{2} \quad \text{fast sicher} \qquad (4)$$

Als Gitter $\{x_i\}$ wählen wir $x_i = i$.

Die Bedingung (4) bedeutet, daß $f_i(\omega,x-x_i)$ und $f_j(\omega,x-x_j)$ für $i \neq j$ nicht überlappen und

$$\chi_{]\xi_i(\omega)-\eta_i(\omega),\xi_i(\omega)+\eta_i(\omega)[}(x) = 1 \quad \text{ist auf }]C_2,C_3[.$$

Dann ist die Menge

$$\Phi = \{ \sum_{i \in Z} \varphi(x-i);\ \varphi = \lambda\ \chi_{]\alpha,\beta[};\ C_1 \leq \alpha \leq C_2,\ C_3 \leq \beta \leq C_4 \}$$

wegen (4) hinreichend für $V_\omega = \sum_{i \in Z^d} f_i(\omega,x-i)$ und wegzusammenhängend.
Daher folgt nach Satz 16 aus

$$]a,b[\cap \sigma(-\Delta + F) = \emptyset \quad \text{für alle } F \in \Phi$$

auch $]a,b[\cap \sigma(-\Delta + V_\omega) = \emptyset$ fast sicher.

Wir untersuchen die Spektren der $H_F = -\Delta + F$, $F \in \Phi$.

Dazu definieren wir:

$$g(\lambda;\gamma,\lambda_o) = \cos\ \gamma(\lambda-\lambda_o)^{1/2} \cos\ (1-\gamma)\lambda^{1/2}$$

$$- \frac{2\lambda-\lambda_o}{2\lambda^{1/2}(\lambda-\lambda_o)^{1/2}}\ \sin\ \gamma(\lambda-\lambda_o)^{1/2} \sin\ (1-\gamma)\ \lambda^{1/2}\ .$$

Nach Flügge [16] gilt für $\lambda \geq 0$, $\beta-\alpha \leq 1$

$$\lambda \in \sigma(\ -\Delta\ +\ \sum_{n=-\infty}^{+\infty}\ \lambda_o \chi_{]\alpha,\beta[}(x+n))$$

genau dann, wenn

$$|g(\lambda;\beta-\alpha,\ \lambda_o)| \leq 1 \qquad \text{gilt.}$$

Folglich ist $\lambda \geq 0$ nicht im Spektrum von $H_\omega = -\Delta + V_\omega$, wenn

$$|g(\lambda,\gamma,\lambda_o)| \geq 1+\varepsilon \text{ ist für alle } \gamma \in [C_3-C_2, C_4-C_1]\ .$$

Dies ist für gewisse λ wegen der Stetigkeit von g jedenfalls dann der Fall, wenn die Länge des Intervalls $[C_3-C_2, C_4-C_1]$, also die Zahl $C_4-C_1-C_2-C_3$ klein genug gewählt wird.

Weitere Untersuchungen zu Energielücken in Kronig-Penney-Modellen wird die in Vorbereitung befindliche Arbeit Kirsch, Martinelli [325] enthalten.

Für eine stochastische Version der dreidimensionalen Punktwechselwirkung wurden in [30] Energielücken nachgewiesen.

Literaturverzeichnis

[1] Albeverio S., Fenstadt J.E., Høegh-Krohn R.:
Singular perturbations and nonstandard analysis
Trans. Amer. Math. Soc. 252, 275-295 (1979)

[2] Albeverio S., Gesztesy F., Høegh-Krohn R.:
The low energy expansion in nonrelativistic scattering theory
Preprint, Bielefeld (1981), (to appear in Ann. Inst. H. Poinc.)

[3] Albeverio S., Høegh-Krohn R.:
Point interaction as limits of short range interactions
Preprint, Bielefeld (1980), (to appear in J. Op. Th.)

[4] Albeverio S., Høegh-Krohn R. Streit L.:
Regularization of Hamiltonians and processes
J. Math. Phys. 21,1636-1640 (1980)

[5] Avron J.E., Grossmann A., Rodriguez R.:
Hamiltonians in one-electron theory of solids I
Rep. Math. Phys. 5, 113-120 (1974)

[6] Avron J.E., Grossmann A., Rodriguez R. :
Spectral properties of reduced Bloch Hamiltonians
Ann. Phys. 103, 47-63 (1977)

[7] Avron J.E., Simon B.:
Almost periodic Schrödinger operators: I Limit periodic potentials
Preprint, Caltech (1981)

[8] Bauer H. : Wahrscheinlichkeitstheorie und Grundzüge der Maßtheorie
De Gruyter, Berlin 1974

[9] Bellissard J., Testard D.:
Almost periodic Hamiltonians: An algebraic approach
Preprint, Marseille (1981)

[10] Bharucha-Reid : Random integral equations
Academic Press, New York 1972

[11] Borland R.E.: Existence of energy gaps in one-dimensional liquids
Proc. Phys. Soc.(London), 78, 926 (1960)

[12] Dinaburg E.I., Sinai Ya.G. : The one-dimensional Schrödinger equation with a quasiperiodic potential
Funct. Anal. Appl. 9, 279-289 (1975)

[13] Doob J.L.: Stochastic processes ; Wiley , New York 1953

[14] Eastham M.S.P.: The spectral theory of periodic differential equations
Scottish Academic Press, Edinburgh 1973

[15] Faris W.G.: Self-adjoint operators
Lecture Notes in Mathematics 433, Springer, Berlin 1975

[16] Flügge S.: Rechenmethoden der Quantenmechanik
Springer, Berlin 1975

[17] Fukushima M.: Dirichlet forms and Markov processes
North-Holland, Amsterdam 1980

[18] Fukushima M.: On spectra of the Schrödinger operator with a Gaussian white noise potential
Z. Wahrscheinlichkeitstheorie verw. Gebiete 37, 267-274 (1977)

[19] Fukushima M.: On the spectral distribution of a disordered system and the range of a random walk; Osaka J. Math. 11, 73-85 (1974)

[20] Fukushima M.: On asymptotics of spectra of Schrödinger operators with random potentials; Preprint, Bielefeld (1980)

[21] Fukushima M., Nagai H., Nakao S.:
On an asymptotic property of spectra of a random difference operator
Proc. Japan. Acad. 51, 100-102 (1975)

[22] Gesztesy F., Kirsch W.: On a singular potential due to Scarf
in Vorbereitung

[23] Gol'dshtein I.J., Molchanov S.A., Pastur L.A.:
A pure point spectrum of the stochastic one-dimensional Schrödinger operator; Funct. Anal. Appl. 11, 1-10 (1977)

[24] Grossmann A., Høegh-Krohn R., Mebkhout M.:
The one particle theory of point interactions
Comm. Math. Phys. 77, 87-110 (1980)

[25] Halperin B.I.: Properties of a particle in a one-dimensional random potential; Adv. Chem. Phys. 13, 123-178 (1967)

[26] Herbst I.W., Sloan A.D.: Perturbation of translation invariant positivity preserving semigroups on $L^2(\mathbb{R}^N)$
Trans. Amer. Math. Soc. 236 ,325-360 (1978)

[27] Jackson J.D.: Classical Electrodynamics; Wiley, New York 1975

[28] James H.M., Ginzbarg A.S.: Band structure in disordered alloys and impurity semiconductors; J. Phys. Chem. 57, 840-848 (1953)

[29] Kerner E.H.: Periodic impurities in a periodic lattice
Phys. Rev. 55, 687-689 (1954)

[30] Kirsch W., Martinelli F.: On the spectrum of Schrödinger operators with a random potential; Preprint, Bielefeld (1980)
erscheint in Comm. Math. Phys.

[31] Kirsch W., Martinelli F.: On the ergodic properties of the spectrum of general random operators; Preprint, Bochum (1981)

[32a] Kirsch W., Martinelli F: On the density of states of random operators; Preprint, Bochum (1981)

[32b] Energy gaps in stochastic point interaction models
erscheint in Proc. der Konferenz "Stochastic Processes", Marseille (1981)

[33] Kittel C.: Einführung in die Festkörperphysik
Oldenbourg, München 1976

[34] Kronig R.L., Penney W.G.: Quantum mechanics of electrons in crystal lattices; Proc. Roy. Soc. (London) A 130 , 499-513 (1931) abgedruckt in [37]

[35] Kuntz H., Souillard B.: Sur le spectre des opérateurs aux differences finies aléatoires; Comm. Math. Phys. 78, 201-246 (1980)

[36] Lamperti J.: Stochastic Processes, Springer, New York 1977

[37] Lieb E.H., Mattis D.C.: Mathematical Physics in one dimension Academic Press, New York 1966

[38] Loéve M.: Probability II, Springer, New York 1978

[39] Ludwig W.: Festkörperphysik , Akademische Verlagsanstalt, Wiesbaden 1978

[40] Luttinger J.M.: Wave propagation in one-dimensional structure Philips Res. Rep. 6, 303-310 (1951), abgedruckt in [37]

[41] Meyèr P.A.: Probability and potentials Blaisdell Publ. Comp., Waltham 1966

[42] Molchanov S.A.: The structure of eigenfunctions of one-dimensional disordered structures; Math. USSR Izv. 12, 69-101 (1978)

[43] Molchanov S.A.: The local structure of the spectrum of the one-dimensional Schrödinger operator; Comm. Math. Phys. 78. 429-446 (1981)

[44] Morgan J.D.: Schrödinger operators whose potentials have separated singularities; J.Oper. Theory 1, 109-115 (1979)

[45] Moser J.: An example of a Schrödinger equation with almost periodic potential and nowhere dense spectrum Preprint, Zürich (1981)

[46] Nakao S.: On the spectral distribution of the Schrödinger operator with random potential; Japan. J. Math. 3, 111-139 (1977)

[47] Neumark M.A.: Lineare Differentialoperatoren Akademie-Verlag, Berlin 1963

[48] Odeh F., Keller J.B.: Partial differential equations with periodic coefficients and Bloch waves in crystals
J. Math. Phys. 5, 1499 (1964)

[49] Omar M.A.: Elementary solid state Physics Addison-Wasley 1975

[50] Pastur L.A.: Spectra of random selfadjoint operators
Russian Math. Surveys 28, 1-67 (1973)

[51] Pastur L.A.: Behaviour of some Wiener integrals as $t \to \infty$ and the density of states of Schrödinger equations with random potential
Theor. Mat. Fiz. 32, 88-95 (1977)

[52] Pastur L.A.: Spectral properties of disordered systems in the one-body approximation; Comm. Math. Phys. 75, 179-196 (1980)

[53] Reed M., Simon B.: Methods of modern Mathematical Physics
Vol. I : Functional analysis 1972
Vol II : Fourier analysis, self-adjointness 1975
Vol IV : Analysis of operators 1978
Academic Press, New York

[54] Saxon D.S., Hutner R.A.: Some electronic properties of a one-dimensional crystal model; Philips Res. Rep. 4, 81-122 (1949)

[55] Scarf F.L.: New soluble energy band problems
Phys. Rev. 112, 1137 (1958), abgedruckt in [37]

[56] Schechter M.: Principles of functional analysis
Academic Press, New York 1971

[57] Simon B.: Quantum Mechanics for Hamiltonians defined as quadratic forms
Princeton University Press 1971

[58] Simon B.: Trace ideals and their applications
Cambridge University Press 1979

[59] Simon B. in: Thirring W. (Hrsg.): The Schrödinger equation
Springer, Wien 1976

[60] Thomas L.E.: Time dependent approach to scattering from impurities in a crystal; Comm. Math. Phys. 33, 335-343 (1973)

[61] Weidmann J.: Lineare Operatoren in Hilberträumen Teubner, Stuttgart 1976

[62] Ziman J.M.: Prinzipien der Festkörpertheorie; Zürich 1975

Lebenslauf

1.2.1956	geboren in Heinsberg als Sohn der Eheleute Werner Kirsch und Elisabeth geb. Jansen
1962-1966	Besuch der kath. Volksschule in Heinsberg
1966-1974	Besuch des Kreisgymnasiums Heinsberg
Juni 1974	Abitur
1974-1979	Studium der Mathematik mit Nebenfach Physik an der Universität Bielefeld
März 1976	Vordiplom in Mathematik
seit März 1978	verheiratet mit Maria Kirsch, geb. Flocke
Juni 1979	Diplom in Mathematik
August 1979 bis Januar 1980	Geschäftsführer im „Universitätsschwerpunkt Mathematisierung der Einzelwissenschaften" an der Universität Bielefeld
seit Februar 1981	Verwalter der Stelle eines wissenschaftlichen Assistenten an der Abteilung für Mathematik an der Ruhr-Universität Bochum
März 1981	Geburt unseres Sohnes Raphael

Bochum, den 9.11.81

Druck: Der Drucker, (Alte) Buscheystraße 138, 4630 Bochum 1, Telefon (0234) 704116